

TRABAJO DE FINAL DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

**ESTUDIO EXPERIMENTAL PARA EL DISEÑO DE PILAS DE
ELECTROLITO ORGÁNICO, EMPLEANDO POLÍMEROS
CONDUCTORES COMO ELECTRODOS**



Memoria y Anexos

Autor:	Adrián Alfonso Villegas
Director:	Núria Borràs Cristòfol
Convocatoria:	Junio 2018

Resum

L'objectiu d'aquest projecte és preparar i caracteritzar una bateria orgànica multicapa de PEDOT i P(EDOT-co-NMePy) amb interfase nanoporosa. Per això s'elaboren tres tipus de films diferents de quatre capes, un amb interfase nanoporosa, un altre amb interfase de NaCl i un altre sense interfase.

Les capes han estat electrogenerades mitjançant cronoamperometries (CA) i les seves propietats elèctriques han estat determinades elaborant ciclovoltamperometries (CV) de 50 cicles i cronopotenciometries (CP) a 1, 2, 5 i 10 mA. Els resultats mostren que al finalitzar els cicles successius les plaques amb interfase nanoporosa han representat una millora al sistema ja que la càrrega elèctrica acumulada és més gran i pateix un desgast inferior al de la resta de films. D'altra banda, les plaques que han resistit millor les CPs han estat les plaques amb interfase salina ja que han estat les úniques que no han polaritzat a cap de les intensitats.

També s'ha elaborat un estudi morfològic per AFM i SEM dels films que ha permès visualitzar els cristalls de sal dipositats així com els nanoporus formats en el procés, a més de corroborar l'increment de la superfície específica obtingut.

Resumen

El objetivo de este proyecto es preparar y caracterizar una batería orgánica multicapa de PEDOT y P(EDOT-co-NMePy) con interfase nanoporosa. Para ello se elaboran tres tipos de films distintos de cuatro capas, uno con interfase nanoporosa, otro con interfase de NaCl y otro sin interfase.

Las capas han sido electrogeneradas mediante cronoamperometrías (CA) y sus propiedades eléctricas han sido determinadas elaborando ciclovoltamperometrías (CV) de 50 ciclos y cronopotenciometrías (CP) a 1, 2, 5 y 10 mA. Los resultados muestran que al finalizar los ciclos sucesivos las placas con interfase nanoporosa han representado una mejora al sistema ya que la carga eléctrica acumulada es mayor y sufre un desgaste inferior al del resto de films. Por otro lado, las placas que han resistido mejor las CPs han sido las placas con interfase salina ya que han sido las únicas que no han polarizado a ninguna de las intensidades.

También se ha elaborado un estudio morfológico por AFM y SEM de los films que ha permitido visualizar los cristales de sal depositados así como los nanoporos formados en el proceso, además de corroborar el incremento de la superficie específica obtenido.

Abstract

The objective of this project is to prepare and characterize a multilayer organic PEDOT and P(EDOT-co-NMePy) battery with a nanoporous interface. For this purpose, three types of films with four layers are elaborated, one with a nanoporous interface, another with a NaCl interface and another without an interface.

The layers have been electrogenerated by chronoamperometries (CA) and their electrical properties have been determined by elaborating cyclic voltammograms (CV) of 50 cycles and chronopotenciometries (CP) at 1, 2, 5 and 10 mA. The results show that at the end of the successive cycles the plates with nanoporous interface have represented an improvement to the system since the accumulated electric charge is bigger and undergoes less wear than the rest of the films. On the other hand, the plates that have better resisted the CPs have been the plates with saline interface since they have been the only ones that have not polarized at any of the intensities.

A morphological study by AFM and SEM has also been made that has allowed to visualize the deposited salt crystals as well as the nanoporous formed in the process. This study also corroborates the increase of the specific area obtained.



Agradecimientos

A mi tutora Núria Borrás, por permitirme realizar este proyecto y ayudarme a resolver las dudas que surgían con entusiasmo, su apoyo me ha sido muy importante para mí.

Al profesor Francesc Estrany y Guillem, por su ayuda y colaboración en el estudio morfológico, el cual no podría haber sido realizado sin ellos.

A Albert, por enseñarme el procedimiento de trabajo además de por los ánimos recibidos durante estos meses, así como al resto de compañeros de laboratorio que han hecho las sesiones más llevaderas.

A mis amigos, por los ánimos y los buenos ratos que pasamos juntos permitiéndome desconectar de los estudios.

Y por último y más importante, a mi familia, por apoyarme y creer en mí.

Gracias.





Glosario

Tabla 1. Glosario de términos.

ADN	Ácido desoxirribonucleico
AFM	Microscopía de fuerzas atómicas
AISI 316	Tipo de acero inoxidable de los electrodos
AVAD	Años de vida ajustados por discapacidad
BacN	Blancos en acetonitrilo
BC	Banda de conducción
BH2O	Blancos en agua
BV	Banda de valencia
Cantiléver	Elemento voladizo
CA	Cronoamperometría
CP	Cronopotenciometría
CV	Ciclovoltamperometría
EDOT	3,4-Etilen-dioxitiofeno
EEBE	Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
EPA	Agencia de Protección Ambiental
Gap	Banda prohibida
LSV	Voltamperometría de barrido lineal
M	Monómero
M*	Monómero activado
MIT	instituto Tecnológico de Massachusetts
NOVA 2.1	Software para la experimentación
P(EDOT-co-NMePy)	Poli(3,4-Etilen-dioxitiofeno -co- N-metilpirrol)
PEDOT	Poli-etilen-dioxitiofen
PGSTAT101	Potenciostato usado
PNMePy	Poli-N-metilpirrol
Q	Carga eléctrica
+Q	Carga positiva
-Q	Carga negativa
R·	Radical libre
SEM	Microscopio electrónico de barrido
UPC	Universitat Politècnica de Catalunya

Tabla 2. Glosario de símbolos.

A	Área superficial
C	Capacitancia Concentración del analito
D	Coeficiente de difusión
d	Distancia
E	Potencial corregido del electrodo

E^0	Potencial en condiciones estándar
F	Fuerza Constante de Faraday
I	Intensidad eléctrica
i_c	Intensidad capacitiva
i_f	Intensidad farádica
$i\tau^{1/2}$	Parámetro de diagnóstico del tiempo
k_z	Constante elástica
l	Longitud
n	Portadores de carga disponibles Cantidad de moles
R	Resistencia eléctrica Constante de los gases
T	Temperatura
t	Tiempo
V	Potencial eléctrico
X	Coeficiente de reacción
ΔV	Diferencia de potencial eléctrico
Δ_z	Compresión del cantiléver
ϵ	Permitividad eléctrica
ϵ_0	Permitividad del vacío
ϵ_r	Permitividad relativa
λ	Carga eléctrica por unidad de longitud
μ	Movilidad de los portadores de carga
ρ	Resistividad eléctrica
σ	Conductividad eléctrica
χ_e	susceptibilidad eléctrica



Índice

RESUM	I
RESUMEN	II
ABSTRACT	III
AGRADECIMIENTOS	V
GLOSARIO	VII
1. PREFACIO	1
1.1. Origen del trabajo	1
1.2. Motivación	2
2. INTRODUCCIÓN	5
2.1. Objetivos del trabajo	5
2.2. Alcance del trabajo	5
3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	7
3.1. Conductividad eléctrica	7
3.1.1. Teoría de bandas.....	9
3.1.2. Dopado.....	10
3.2. Polímeros conductores.....	12
3.2.1. Monómeros heterocíclicos	13
3.2.2. Polimerización.....	14
3.2.3. Electropolimerización	15
3.2.4. Poli(3,4-etilendioxitiofeno) o PEDOT	16
3.2.5. Poli(N-metilpirrol) (PNMePy).....	17
3.2.6. Poli(3,4- etilendioxitiofeno-co-N-metilpirrol) (P(EDOT-co-NMePy))	17
3.2.7. Sistemas multicapa	19
3.2.8. Interfase nanoperforada.....	20
3.2.9. Capacitadores.....	21
3.2.10. Supercapacitadores	23
3.2.11. Microscopía electrónica de barrido (SEM)	24
3.2.12. Microscopía de fuerzas atómicas (AFM)	26
3.3. Electroquímica	27
3.3.1. Celdas electroquímicas	28
3.3.2. Electroodos.....	29

3.3.3.	Potenciostato-galvanostato	30
3.3.4.	Ordenador con software NOVA 2.1.	31
3.4.	Métodos electroquímicos	32
3.4.1.	Voltamperometría de barrido lineal	32
3.4.2.	Ciclovoltamperometría.....	33
3.4.3.	Cronopotenciometría	34
3.4.4.	Cronoamperometría (CA).....	35
4.	MATERIAL Y REACTIVOS	37
4.1.	Material de laboratorio.....	37
4.2.	Reactivos	37
4.2.1.	Agua destilada	38
4.2.2.	Acetonitrilo	39
4.2.3.	Perclorato de litio	39
4.2.4.	EDOT (3,4-Etilendioxitiofeno).....	40
4.2.5.	Acetona.....	41
4.2.6.	Etanol	42
4.2.7.	Cloruro de sodio	42
5.	PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL	44
5.1.	Preparación del electrolito de EDOT	44
5.2.	Preparación del electrolito de copolímero.....	44
5.3.	Preparación de la disolución de agua con sal al 20%	44
5.4.	Preparación de los electrodos	45
5.5.	Preparación de la celda.....	45
5.6.	Ciclovoltamperometría de control	45
5.7.	Preparación de la multicapa	46
5.8.	Ciclovoltamperometría	48
5.9.	Cronopotenciometría.....	49
6.	RESULTADOS	50
6.1.	Cronoamperometrías.....	50
6.2.	Ciclovoltamperometrías (CV).....	52
6.2.1.	Blancos en acetonitrilo	52
6.2.2.	Blancos en agua	54
6.2.3.	Comparación de blancos	56
6.2.4.	Placas con interfase salina.....	57
6.2.5.	Placas con interfase nanoporosa	59

6.2.6.	Comparación entre interfases	61
6.2.7.	Comparación entre todas las placas.....	62
6.3.	Perdida de electroestabilidad (LEA)	64
6.3.1.	Blancos en acetonitrilo	64
6.3.2.	Blancos conservados en agua	66
6.3.3.	Comparación de blancos.....	67
6.3.4.	Placas con interfase salina	69
6.3.5.	Placas con interfase nanoporosa	71
6.3.6.	Comparación de placas con interfase.....	73
6.3.7.	Comparación entre todas las placas.....	74
6.4.	Cronopotenciometrías (CP)	77
6.4.1.	Cronopotenciometrías de los blancos en acetonitrilo	77
6.4.2.	Cronopotenciometrías de los blancos en agua	78
6.4.3.	Cronopotenciometrías de las placas con interfase salina	78
6.4.4.	Cronopotenciometrías de las placas con interfase nanoporosa.....	79
6.4.5.	Cronopotenciometrías a 1 mA.....	80
6.4.6.	Cronopotenciometrías a 2 mA.....	81
6.4.7.	Cronopotenciometrías a 5 mA.....	81
6.4.8.	Cronopotenciometrías a 10 mA.....	82
6.4.9.	Resumen de cronopotenciometrías	83
6.5.	Estudio morfológico.....	84
6.5.1.	Microscopía de fuerzas atómicas (AFM)	84
6.5.2.	Microscopía electrónica de barrido (SEM)	87
7.	ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	91
	CONCLUSIONES	93
	PRESUPUESTO	94
7.1.	Costes de material de laboratorio.....	94
7.2.	Coste de reactivos.....	94
7.3.	Coste de equipo	95
7.4.	Coste de personal	95
7.5.	Costes de alquiler.....	96
7.6.	Coste total.....	96
	BIBLIOGRAFÍA	99
	ANEXO A: FICHAS DE SEGURIDAD	105

A1.	3,4-Etilendioxitiofeno (EDOT)	105
A2.	N-Metilpirrol (NMePy)	109
A3.	Acetonitrilo (CH_3CN)	126
A4.	Perclorato de litio (LiClO_4).....	141
A5.	Cloruro de sodio (NaCl).....	145
A6.	Acetona ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$).....	155
A7.	Etanol ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$)	174
ANEXO B: IMÁGENES DE SEM		194

1. Prefacio

1.1. Origen del trabajo

Convencionalmente, los materiales poliméricos ofrecen una resistencia significativa a la conducción eléctrica y son dieléctricos o aislantes (Jangid et al. 2014). Durante años estos compuestos han sido estudiados, no obstante sus posibles propiedades eléctricas a menudo fueron pasadas por alto.

En 1888 Dennstedt publicó un extenso trabajo sobre el pirrol pero su conductividad eléctrica no fue estudiada hasta el año 1963. Fue en esta década cuando se inició un estudio sistemático en este campo, donde la aplicación de procesos de oxidación permitía generar compuestos poliaromáticos (en especial poliheterociclos) capaces de obtener conductividades de hasta $0,1 \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ (UPC, n.d.). En 1963, Dall'Ohio y sus colaboradores iniciaron la síntesis electroquímica de polímeros conductores, obteniendo el negro de pirrol, con una conductividad eléctrica de $8 \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$. Durante los siguientes años se estudió el polisulfonitrilo, con una conductividad mucho mayor ($10^3 \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$), desafortunadamente su interés decreció debido a la naturaleza explosiva del monómero (S_2N_2).

En el año 1973, Walataka, Labes y Perlstein descubrieron que los nitruros de polisulfuro $(\text{SN})_x$ exhibían conductividad metálica, aumentando el interés por nuevos materiales y desterrando así la idea de que fueran intrínsecamente aislantes que sólo podían pasar a ser conductores por adición de partículas de materiales conductores.

En 1977, Hegger y MacDiarmid observaron que a temperatura ambiente, la conductividad de los nitruros de polisulfuro se incrementaba diez veces después de ser oxidado con bromo (Br_2). Esto demostró que la adición de impurezas aumentaba la conductividad. Poco después, estos investigadores en colaboración con Sharikawa Hideki, descubrieron que dopando estos compuestos con impurezas de yodo la conductividad resultante era 10^7 veces mayor. Estos descubrimientos permitieron el auge de nuevos materiales que combinan las propiedades eléctricas de los metales y semiconductores con las ventajas de los plásticos (Z. (Daniel Z. Wang, Wille, and Juaristi 2018). Fueron galardonados con el premio Nobel de Química por este hallazgo.

Durante los siguientes años, la investigación en estos materiales continuo, destacando los estudios de Díaz en 1979, en el que obtuvo películas de negro de pirrol continuas y que podían ser desenganchadas sobre electrodos de platino en acetonitrilo. También destacan los estudios del mecanismo de generación del polipirrol por Genies y Bidan en 1983, el trabajo de Satoh en 1986 que determinó que había una concentración límite del dopante en el polímero y el estudio de Ferraris y

Skiles en 1987 de los polímeros obtenidos a partir de diversos monómeros de anillos de tres heterociclos (UPC, n.d.).

Durante las siguientes décadas, las investigaciones continúan, descubriendo nuevas aplicaciones para estos materiales destacando en el campo de la biotecnología, útiles para la fabricación de biosensores (Jangid et al. 2014) y músculos artificiales.

Recientemente, se ha preparado una serie de sistemas compuestos de films superpuestos, denominados multicapas a partir de dos polímeros conductores distintos. Se ha comprobado que el área de oxidación y reducción de los voltamperogramas de control es notablemente mayor a la suma de las áreas de los films monocapa de cada uno de los homopolímeros que lo integran (Estrany Coda et al. 2011). Este mismo estudio ha comprobado que en el caso de los sistemas multicapa compuestos por PEDOT-PNMePy-PEDOT de tres, cinco o siete capas son mucho más electroactivos que un film compuesto de un único tipo de polímero.

En el año 2017, la superioridad del sistema PEDOT/P(EDOT-co-NMePy) de tres capas como supercapacitador electroquímico fue establecida en comparación a otros sistemas multicapas de 3 films (Borras, Estrany, and Alemán 2017). Este proyecto tomará de partida este estudio investigando sistemas multicapa de PEDOT y de P(EDOT-co-NMepy) con interfase vacía.

1.2. Motivación

Las baterías se encuentran en muchos de los dispositivos electrónicos de nuestros hogares y centros de trabajo. Existen una gran variedad de pilas de uso doméstico en el mercado y podemos clasificarlas acorde diferentes criterios. Según su ciclo de vida, se distinguen:

- **Baterías primarias:** Aquellas que no pueden ser recargadas y por lo tanto han de ser desechadas tras su uso.
- **Baterías secundarias:** Aquellas que pueden ser recargadas y por lo tanto pueden ser usadas un número limitado de veces.

Las baterías están compuestas en su mayoría por ácidos y metales pesados como mercurio, níquel, plomo, zinc y cadmio así como cobre y litio entre otros. Durante su uso, estos componentes no suponen un peligro para el medio ambiente ni a la salud de las personas. Sin embargo, al final de su vida útil se puede producir la corrosión de la carcasa protectora liberando así estos materiales a la biosfera. Estos componentes son altamente contaminantes, en concentraciones elevadas son capaces de cambiar la alcalinidad del suelo y pequeñas cantidades pueden contaminar una gran cantidad de agua. Esto es debido a que estos compuestos no se ven afectados durante la

descomposición de los residuos orgánicos y una vez emitidos, pueden permanecer en el medioambiente durante cientos de años.

La alta concentración de metales pesados en los suelos y aguas se refleja en concentraciones presentes en plantas, animales y humanos (Olafisoye, Adefioye, and Osibote 2013). Esto es debido a que estos compuestos son fácilmente absorbidos por las raíces de las plantas, y al ser consumidas por animales y seres humanos la concentración de estas sustancias va aumentando en el organismo. Algunos de los riesgos que suponen a la salud de los seres humanos son discapacidad intelectual en infantes, demencia, trastornos del sistema nervioso central, enfermedades renales y hepáticas, insomnio, inestabilidad emocional y trastornos de visión (Jan et al. 2015).

Un claro ejemplo del peligro que esto representa se halla en el plomo, aproximadamente, el 85% del consumo total de plomo es para la producción de baterías de plomo y ácido. Según datos de 2016, se estima que la exposición a plomo ocasionó 495.550 muertes y una pérdida de 9,3 millones de años de vida ajustados por discapacidad (AVAD) (Tempowski 2017).

Las baterías orgánicas surgen como alternativa ecológica y sostenible, con un menor impacto ambiental y peligro a la salud pública. Actualmente se investiga el uso de polímeros conductores generados electroquímicamente que además suponen una mejora económica respecto a los modelos de baterías tradicionales.

Por lo tanto, la motivación para elaborar este proyecto es el interés de aplicar los conocimientos obtenidos durante la carrera para ayudar a la investigación de un producto útil y sostenible.

2. Introducción

2.1. Objetivos del trabajo

Los objetivos principales del trabajo son:

- Preparar y caracterizar una pila orgánica mediante films de polímero conductor con interfase nanoperforada.
- Evaluar los resultados obtenidos comparándolos con films sin interfase nanoperforada.
- Elaborar un estudio morfológico de las multicapas.

Para ello se han de asumir una serie de objetivos previos:

- Estudio previo de las técnicas electroquímicas así como de los polímeros conductores.
- Dominio del software NOVA 2.1.
- Establecer un procedimiento válido de trabajo en el laboratorio.
- Generar y caracterizar multicapas de PEDOT y P(EDOT-co-NMePy).
- Añadir una interfase nanoperforada ente las capas de P(EDOT-co-NMePy).

2.2. Alcance del trabajo

En el presente proyecto se estudia las mejoras eléctricas de los films multicapa PEDOT y P(EDOT-co-NMePy) mediante la inclusión de una interfase nanoperforada. Para ellos se elaboran tres tipos de films distintos según la interfase:

1. Interfase nanoperforada.
2. Interfase de NaCl.
3. Sin interfase.

Los métodos electroquímicos serán elaborados con el potenciostato PGSTAT101 de los laboratorios de la EEBE y el software NOVA 2.1.

Las generaciones de cada una de las capas se han elaborado usando las mismas condiciones, especificadas en el apartado 5.7, para asegurar que la superficie de cada capa no se vea modificada durante la formación de la siguiente que quedará superpuesta. Esto mismo se ha seguido tanto en las ciclovoltamperometrías (CV) y cronopotenciometrías (CP) para poder comparar los diferentes tipos de films, especificado en los apartados 5.8 y 5.9.

Todos los métodos electroquímicos se elaboran en presencia de una atmosfera de nitrógeno para evitar oxidaciones involuntarias.

3. Fundamentos teóricos

3.1. Conductividad eléctrica

La conductividad (σ) es la medida de la capacidad que tiene un material para pasar una corriente eléctrica a través de él, sus unidades son siemens/centímetro (S/cm) o $(\Omega \text{ cm})^{-1}$. En soluciones la corriente es transportada por cationes y aniones, mientras que en metales es transportada por electrones.

Es la inversa de la resistividad eléctrica (ρ):

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (\text{Ec. 3.1})$$

Donde la resistividad para un material con una sección transversal uniforme es:

$$\rho = \frac{R \cdot A}{l} \quad (\text{Ec. 3.2})$$

Dónde R es la resistencia eléctrica, A es el área transversal y l es la longitud del material. La ley de Ohm postula que al aplicar una diferencia de potencial se transmite una corriente eléctrica directamente proporcional a la resistencia del material tal y como se muestra a continuación:

$$V = I \cdot R \quad (\text{Ec. 3.3})$$

Por lo que a un mismo potencial, cuanto mayor sea la intensidad medida, mayor será la conductividad del material. La intensidad eléctrica se mide en Amperios (A) mientras que el voltaje se mide en voltios (V).

La conductividad de un material viene determinada por dos factores, la densidad del número de portadores de carga disponibles (n) y de su movilidad (μ), siendo e la carga del electrón.

$$\sigma = n \cdot \mu \cdot e \quad (\text{Ec. 3.4})$$

En un semiconductor, tanto la movilidad como la densidad de portadores de carga dependen de la temperatura. La movilidad de los portadores en un semiconductor también está influenciada por la presencia de impurezas cargadas. A temperaturas bajas, los portadores se mueven más lentamente por lo que el tiempo de interacción con las impurezas es mayor, como resultado, a medida que la temperatura disminuye, la dispersión de impurezas aumenta y la movilidad disminuye (Kasap et al.

2000). La densidad del número de portadores de carga disponibles también se ve aumentada al aumentar la temperatura.

Lo contrario sucede en los materiales metálicos, ya que las vibraciones de la red hacen que la movilidad disminuya al aumentar la temperatura. Por lo tanto, en un material metálico la conductividad eléctrica disminuye al aumentar la temperatura (Kasap et al. 2000).

En medio líquido, la conductividad se mide típicamente en soluciones acuosas de electrolitos. Los electrolitos son sustancias que contienen iones (cationes y aniones) en solución que son responsables de llevar la corriente eléctrica. Los electrolitos incluyen ácidos, bases y sales (SAS 2004). Hay dos tipos de electrolitos:

- **Electrolitos fuertes:** sustancias que están completamente ionizadas en solución, la concentración de iones en la solución es proporcional a la concentración del electrolito agregado.
- **Electrolitos débiles:** sustancias que no están completamente ionizadas en solución, pueden conducir electricidad, pero no tan bien como un electrolito fuerte debido a la menor cantidad de iones disponibles para llevar la carga de un electrodo a otro.

Los átomos de los elementos metálicos se caracterizan por la presencia de electrones de valencia, estos electrones se encuentran en la capa exterior de un átomo que se mueven libremente. Estos electrones permiten que los metales conduzcan la electricidad. La teoría de bandas explica la conductividad basándose en el concepto “distancia entre capas electrónicas”, explicada en el apartado 3.1.1.

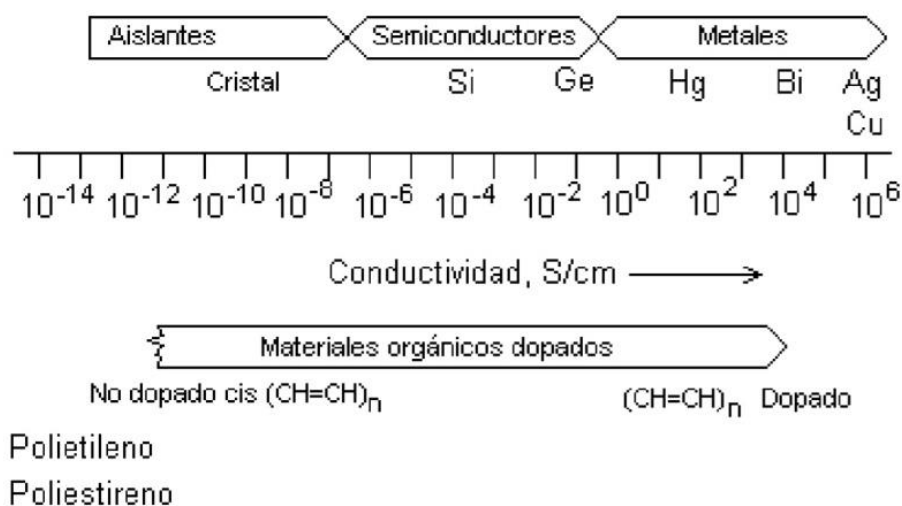


Figura 1. Escala comparativa de conductividad para diversos materiales incluyendo polímeros orgánicos antes y después del dopado (Fuente: UPC, n.d.).

3.1.1. Teoría de bandas

En mecánica cuántica, la teoría de bandas describe las propiedades eléctricas de un material como una estructura de bandas electrónicas. Cuando los átomos se unen para formar un compuesto, sus energías de orbitales atómicos se unen para formar energías de orbitales moleculares. A medida que se van formando estos orbitales moleculares, sus niveles de energía empiezan a unirse formando lo que se denomina bandas de energía.

Las bandas de energía se dividen en tres tipos:

- **Banda de valencia (BV):** Ocupada por los electrones que se encuentran en el nivel de energía más externo y permiten los enlaces entre átomos.
- **Banda de conducción (BC):** Contiene electrones libres con facilidad de movimiento responsables de conducir la corriente eléctrica. Es la capa superior a la capa de valencia.
- **Banda prohibida o gap:** Estado de energía donde ningún electrón puede situarse, localizada entre la banda de valencia y la banda de conducción.

El tamaño de la banda prohibida o “gap” explica el comportamiento de los materiales conductores, semiconductores y aislantes. Para pasar un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción hace falta aplicar una energía para que se produzca el salto.

En los conductores ambas capas están parcialmente ocupadas por electrones y la banda prohibida tiene un valor de prácticamente cero, por lo que las bandas de valencia y conducción se encuentran superpuestas facilitando el paso de electrones.

En los materiales aislantes la banda de valencia está completamente llena de electrones y separada por una gran banda prohibida de aproximadamente 6 eV que impide el flujo de electrones (UNT 2016).

En un material semiconductor existe banda prohibida inferior a la existente en los materiales aislantes de aproximadamente 1eV. Este hecho permite que al elevar la temperatura los electrones de valencia adquieran una energía térmica mayor que la energía de gap y por lo tanto se muevan así a la banda de conducción. Este hecho también puede suceder al aplicar un campo eléctrico externo (Luis Farrera G. 2014).

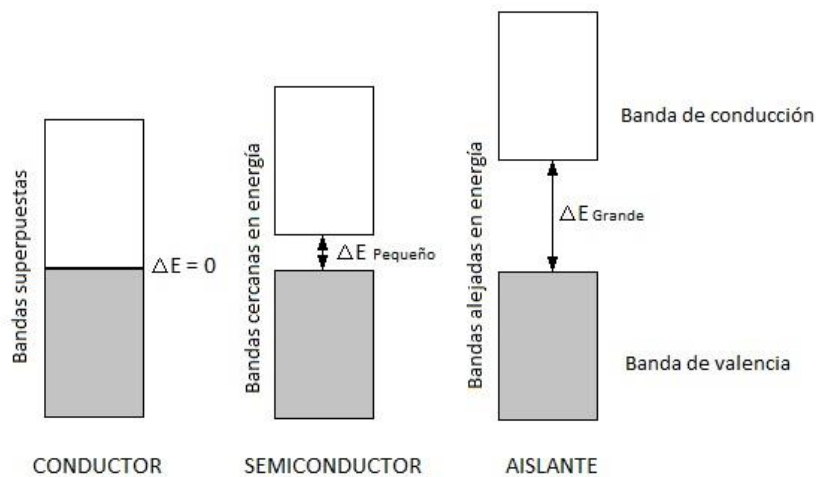


Figura 2. Esquema representativo de la energía de gap para un material conductor, un semiconductor y un aislante (Fuente: Quimitube 2018).

Los polímeros son generalmente materiales aislantes ya que el nivel energético de la banda prohibida es demasiado grande como para permitir el paso de electrones. Por ello, el comportamiento de los polímeros conductores ha de ser explicado mediante el fenómeno del dopado.

3.1.2. Dopado

El dopaje es el proceso por el cual un material polimérico aislante pasa a ser conductor mediante la introducción o extracción de cargas parciales (impurezas) en la cadena mediante un proceso químico o electroquímico. Los semiconductores puros o intrínsecos a los que se les añade un dopante se denominan semiconductores extrínsecos.

Según la naturaleza de las impurezas existen dos tipos de dopados, el dopado tipo n y el dopado tipo p.

- **El dopado tipo p** consiste en la oxidación del polímero, el dopante extrae un electrón de la banda de valencia creando un hueco que actúa como transportador de carga positiva y deja la molécula del polímero cargado positivamente, neutralizándose con el anión del dopante. Algunas impurezas añadidas para obtener este tipo de dopantes son el boro, el aluminio o el galio.
- **El dopado tipo n** consiste en la reducción del polímero, el dopante extrae un electrón de la banda de conducción y deja la molécula del polímero cargado negativamente neutralizándose con el catión del dopante (Jiménez 2017). Algunas impurezas añadidas para obtener este tipo de dopantes son el fósforo, arsénico o el antimonio.

El dopado tipo p de un polímero produce un hueco o radical-catión denominado polarón en el que la carga queda compensada con la de los iones del electrolito de fondo, cuando al polarón se le extrae otro electrón se obtiene un doble radical-catión situado en dos unidades monoméricas denominado bipolarón. La presencia y movilidad de los polarones y bipolarones es el mecanismo dominante en el transporte de carga en los polímeros conductores (Jiménez 2017). Este tipo de dopaje es el más típico en los polímeros conductores debido a su facilidad de obtención.

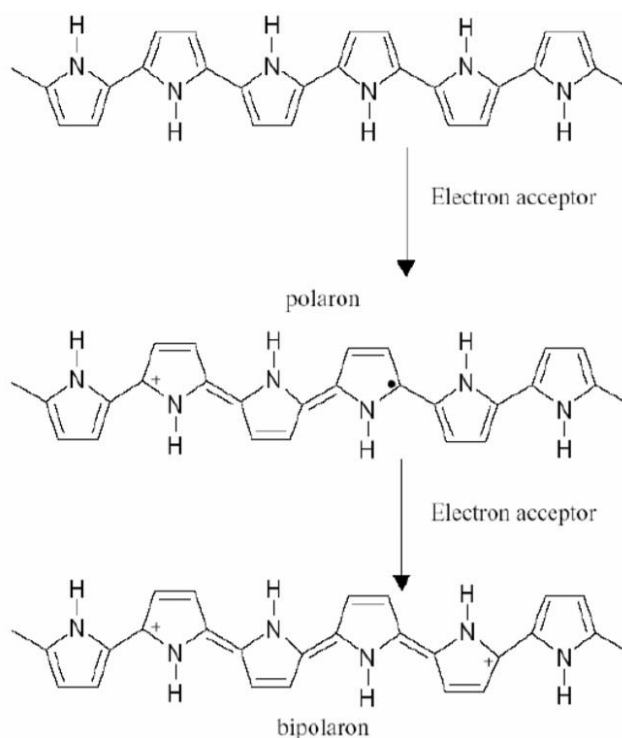


Figura 3. Esquema de formación de un polarón y de un bipolarón mediante la oxidación del polipirrol PPy (Fuente: Ates, Karazehir, and Istanbul 2012).

Experimentalmente, se ha demostrado que el dopaje de un compuesto modifica la estructura electrónica del polímero de un semiconductor a un metal y que además, este proceso es reversible (Heeger et al. 1988).

La unión p-n es la conjunción de dos tipos de semiconductores p y n dentro de un solo cristal de semiconductor. Cuando la banda de valencia de un semiconductor tipo p se alinea con la banda de conducción de un semiconductor tipo n, los electrones y los huecos se ponen en contacto eliminándose mutuamente originando un campo eléctrico en la zona de unión en dirección n a p. Este tipo de unión es comúnmente usada en la fabricación de celdas solares (Mitlyng and Ganz 2012).

3.2. Polímeros conductores

Un polímero conductor es una macromolécula orgánica formada por la unión de unidades llamadas monómeros mediante enlaces covalentes capaces de conducir la electricidad. Los polímeros constan de grandes cadenas carbonadas con enlaces simples y dobles alternados denominados enlaces conjugados que crean una región de deslocalización electrónica. En esta región los electrones de valencia tienen una gran libertad de movimiento y se sitúan de manera uniforme alrededor del compuesto por lo que no pertenecen a un solo átomo o enlace.

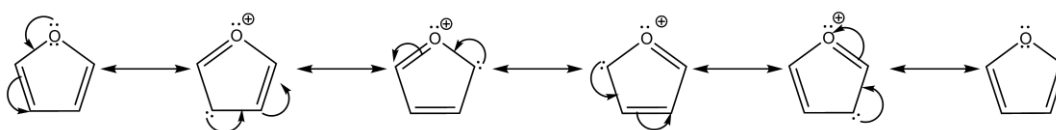


Figura 4. Esquema representativo de la deslocalización electrónica del furano.

Los polímeros son materiales aislantes por lo que necesitan someterse a un proceso de dopado (apartado 3.1.2) para favorecer el paso de cargas eléctricas. Los polímeros estudiados en este proyecto son del tipo extrínseco, es decir, un dopado ha sido aplicado. Los polímeros con un dopado tipo p son aquellos en el que las moléculas son capaces de conducir electricidad por su propia naturaleza debido al movimiento de los polarones y bipolarones formados.

Los polímeros conductores del tipo n son aquellos que requieren de la adición de impurezas metálicas o de tipo grafito. Este tipo de material es menos común que los polímeros intrínsecos debido a que tienen una gran facilidad de oxidarse en presencia del oxígeno atmosférico.

Los polímeros conductores son preparados a partir del monómero apropiado por oxidación química o electroquímica. Cuando un polímero es formado por un único tipo de monómero se denomina homopolímero. Cuando un polímero está formado por más de un monómero diferente se denomina copolímero.

Uno de los principales problemas para la caracterización de este tipo de polímeros se debe a su insolubilidad, por lo que los métodos electroquímicos resultan de gran utilidad, así como las técnicas espectroscópicas (Choy M. Marisela 2008).

El interés en este tipo de materiales reside en combinar las propiedades eléctricas de los metales con la estabilidad del plástico, además de su facilidad y bajo coste de obtención. Destaca también su resistencia a la corrosión y su compatibilidad con células vivas. Algunas de las aplicaciones de los polímeros conductores son (Jiménez 2017):

- Elaboración de baterías y acumuladores orgánicos.
- Elaboración de transistores electrónicos.
- Elaboración de pilas de combustible.
- Elaboración de celdas fotovoltaicas.
- Recubrimientos protectores de la corrosión.
- Elaboración de membranas de depuración de aguas residuales.
- Elaboración de sensores y biosensores.
- Elaboración de músculos y nervios artificiales.
- Elaboración de sistemas de liberación controlada de fármacos.

3.2.1. Monómeros heterocíclicos

Los polímeros generados electroquímicamente suelen estar formados por moléculas de compuestos aromáticos entre los que destacan los heterocíclicos. Un compuesto heterocíclico es una sustancia que contiene un anillo aromático formado por más de un tipo de átomo, comúnmente nitrógeno (N), oxígeno (O) y azufre (S) además del carbono (Estrany Coda et al. 2011).

Los monómeros heteroátomos más simples son aquellos que solo contienen uno de estos átomos, estos compuestos son el pirrol con un átomo de nitrógeno, el furano con un átomo de oxígeno y el tiofeno con un átomo de azufre.

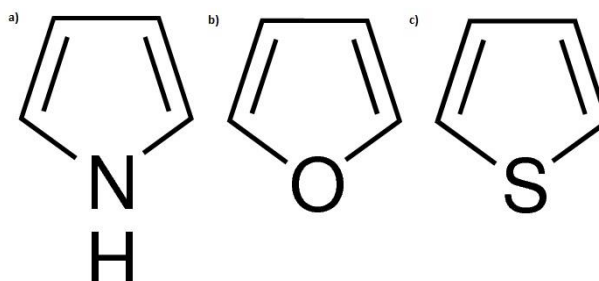


Figura 5. Estructura molecular de a) pirrol b) furano y c) tiofeno.

Los monómeros heterocíclicos que se usan en la elaboración de este proyecto son el 3,4-etilendioxitiofeno (EDOT) y el N-metilpirrol (NMePy).

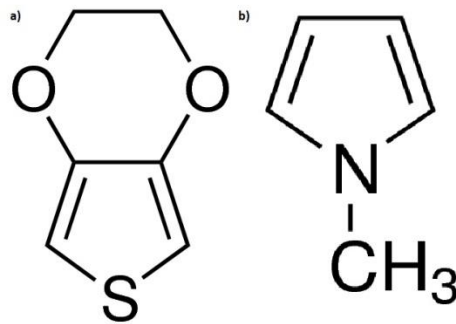


Figura 6. Estructura molecular de a) EDOT b) NMePy.

Los grupos alcoxi del EDOT facilitan el proceso de dopado y aportan estabilidad en estado conductor respecto al tiofeno debido a su propiedad liberadora de electrones (Estrany Coda et al. 2011). En el caso del NMePy, el grupo metilo añadido resuelve problemas de solubilidad e intratabilidad presentes en el pirrol (Jiménez 2017).

3.2.2. Polimerización

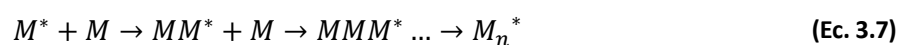
La polimerización es el proceso químico en el cual las unidades monoméricas se unen para formar largas cadenas denominadas polímeros. Las reacciones de polimerización responden principalmente a dos tipos distintos, la polimerización por adición o en cadena y la polimerización por condensación o por etapas.

La polimerización por adición es la que se formen radicales libres como especies intermedias o en otros casos, mediante la formación de iones (carbocationes y carboaniones). Las tres etapas en las que transcurre esta reacción son:

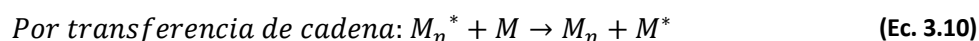
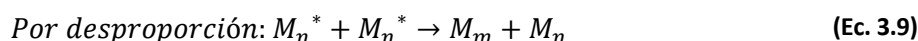
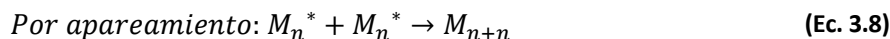
- **Iniciación:** Se forman los monómeros activados, esto puede conseguirse por acción de calor, por acción fotoquímica o por acción de otros compuestos. $R\cdot$ representan los radicales libres, M es un monómero y M^* es un monómero activado.



- **Propagación:** El radical o monómero activado formado en la etapa de iniciación se va adicionando a los monómeros. La energía de activación necesaria es de 7000 cal/mol, por lo que la secuencia de adición es muy rápida (Universidad politecnica de Madrid 2010).



- **Terminación:** Se obtiene el polímero por pérdida de actividad de las cadenas formadas. Algunos mecanismos de terminación son por adición entre sí con pérdida de actividad entre dos cadenas, por desproporción en el que se obtienen dos cadenas distintas o por transferencia de cadena.



La polimerización por condensación corresponde a procesos donde se produce la eliminación de una molécula ligera como el agua, amoníaco o el ácido clorhídrico. El producto resultante contiene una composición centesimal distinta a la del monómero de partida, y puede ser un homopolímero o un copolímero. El producto obtenido se denomina policondensado.

3.2.3. Electropolimerización

El flujo de una corriente anódica a través de una disolución que contiene un disolvente, un electrolito, y un monómero da lugar a la generación de una película polimérica en el ánodo. Las películas poliméricas así generadas se caracterizan por altas conductividades electrónicas intrínsecas a la cadenas poliméricas (Otero 2003).

Los pasos en una electropolimerización son los mismos que en las polimerizaciones por adición.

- **Iniciación:** Se forma un radical-catión monomérico ($M \cdot^+$) a través de la oxidación anódica del polímero por lo que el monómero (M) pierde un electrón (e^-).



- **Propagación:** Se produce la polimerización a partir de los radicales-catión monoméricos, se proponen dos vías, a través de una policondensación (a) y a través de una reacción del radical-catión con el monómero (b).



- **Terminación:** Se detiene la reacción y se obtiene el polímero final.

Durante este proceso pueden producirse reacciones paralelas, estas reacciones son fáciles de detectar si se producen cambios en la corriente a lo largo del tiempo de polimerización, pudiendo afectar a la cinética de polimerización.

La mayor ventaja de la síntesis por vía electroquímica es la posibilidad de controlar rigurosamente los parámetros de síntesis, por lo que el espesor de las capas obtenidas es altamente reproducible.

3.2.4. Poli(3,4-etilendioxitiofeno) o PEDOT

El polímero obtenido a partir del monómero 3,4-etilendioxitiofeno o EDOT se denomina poli(3,4-etilendioxitiofeno) o PEDOT. Esta molécula es considerada uno de los polímeros conductores más exitosos debido su baja separación entre bandas, excelente estabilidad ambiental, alta conductividad eléctrica y transparencia en películas finas oxidadas (Pyshkina 2010). Se puede sintetizar de varias maneras, incluida la oxidación química directa y la oxidación electroquímica tal y como se hace en este proyecto.

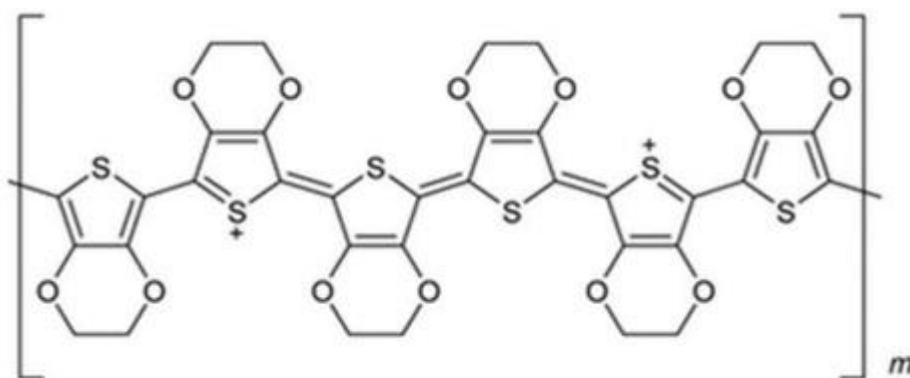


Figura 7. Estructura molecular del PEDOT (Fuente: Mantione et al. 2017).

Este polímero puede ser p- y n- dopado. En estado oxidado p-dopado tiene color azul oscuro y altas conductividades que pueden alcanzar entre 200 y 300 S/cm (Estrany Coda et al. 2011), con una alta estabilidad en el tiempo de 1000 h a 120°C a presión atmosférica. Presenta un bajo potencial de oxidación y se puede someter a rápidos cambios de carga y descarga. En estado reducido n-dopado tiene un color azul claro. El PEDOT puede pasar fácilmente del dopado tipo n al dopado tipo p y viceversa en procesos redox repetitivos, haciéndolo muy atractivo para múltiples aplicaciones (Jiménez 2017) como recubrimientos y como sustrato de soporte celular debido a su propiedad de enlazarse con cadenas de aminoácidos como el ADN.

3.2.5. Poli(N-metilpirrol) (PNMePy)

El poli(N-metilpirrol) o PNMePy es el polímero obtenido a partir del monómero N-metilpirrol. La conductividad del PNMePy puede alcanzar los 0,62 S/m, muy inferior al valor de conductividad del EDOT o del polipirrol (PPy), que alcanza unos valores de 370 S/m. Su baja conductividad es ventajosa para la fabricación de capacitores eléctricos (Jiménez 2017).

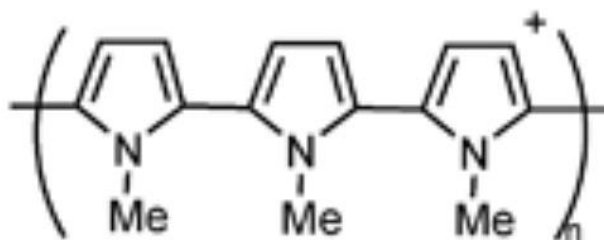


Figura 8. Estructura molecular del PNMePy (Fuente: Sarhan and Bolm 2009).

Pese a que su estabilidad ambiental es inferior a la del PEDOT al igual que su electroactividad, su estabilidad electroquímica es notable, comparable a la del PEDOT, ya que sus áreas de oxidación y reducción apenas disminuyen tras la aplicación de ciclos de carga y descarga sucesivos. El uso de PNMePy como protector de corrosión resulta interesante debido a esta estabilidad electroquímica y su ventaja económica respecto al PEDOT y al pirrol (Sigma-Aldrich 2018d).

La buena estabilidad que caracteriza al PEDOT, junto con las buenas propiedades conductoras del PNMePy hacen interesante combinar ambos componentes en un film, ya sea combinando films sucesivos en un sistema multicapa o generando un copolímero denominado poli(3,4-etilendioxitiofeno-co-N-metilpirrol) o P(EDOT-co-NMePy).

3.2.6. Poli(3,4- etilendioxitiofeno-co-N-metilpirrol) (P(EDOT-co-NMePy))

La unión de PEDOT y PNMePy en un mismo film o P(EDOT-co-NMePy) se obtiene al electrogenerar sobre un electrodo en una disolución que contenga monómeros de EDOT y NMPy. Esto es debido a que el potencial de oxidación de ambos polímeros es muy similar.

Durante la generación del copolímero, se observa que cuanto mayor es la proporción molar de EDOT en el medio de generación, la densidad de corriente disminuye.

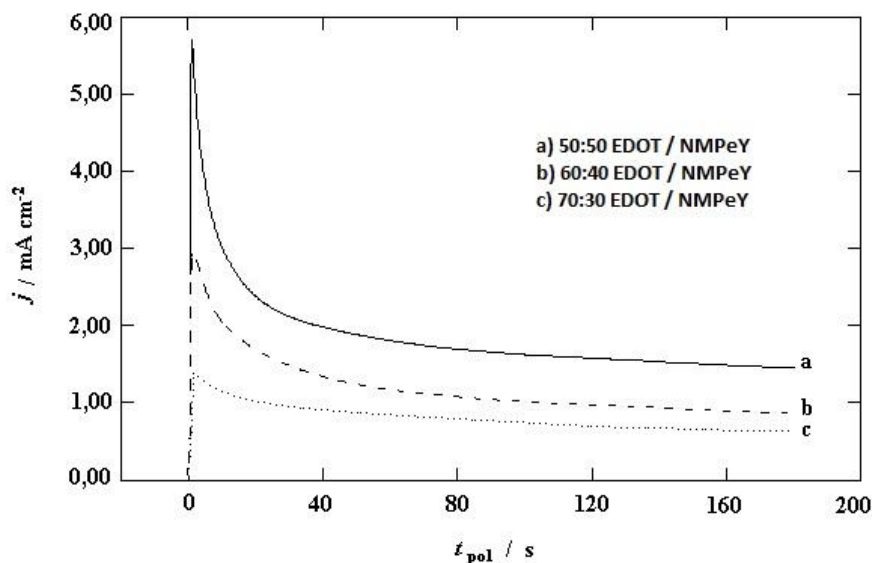


Figura 9. Cronoamperometría de generación de P(EDOT-co-NMMePy) a diferentes proporciones molares en el medio de generación (Fuente: UPC, n.d.)

Las propiedades del copolímero obtenido son más similares al PNMePy que al EDOT, pese a ello, la electroactividad del copolímero es claramente inferior a la de cada uno de los homopolímeros correspondientes. Su estabilidad electroquímica es también inferior, ya que las áreas de oxidación y reducción se reducen mucho más en las primeras repeticiones del ciclo (UPC, n.d.).

Se ha usado P(EDOT-co-NMMePy) como film central en sistemas de tres capas, siendo las capas exteriores de PEDOT con el objetivo de obtener beneficios asociados a la incorporación de nano características relevantes. Estas nano características se basan en la organización bifásica de las cadenas de P(EDOT-co-NMMePy), transformando la capa dieléctrica intermedia en una disposición aleatoria de muchas nanocapas dieléctricas repartidas de manera heterogénea, que actúan como nanocapacitores conectados en serie y en paralelo (Borras, Estrany, and Alemán 2017).

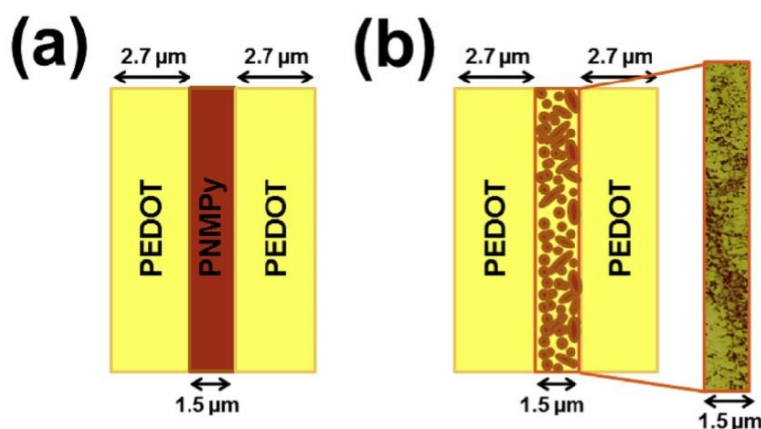


Figura 10. Esquemas representativos del comportamiento de a) Sistema multicapa PEDOT y PNMePy b) Sistema multicapa de PEDOT y P(EDOT-co-NMMePy) (Fuente: Borras, Estrany, and Alemán 2017).

Los resultados de este experimento muestran que los sistemas de tres capas con interfase de P(EDOT-co-NMePy) presentan una mayor capacidad de almacenaje de carga que los sistemas equivalentes con interfase homogénea de PNMePy.

3.2.7. Sistemas multicapa

Los compuestos multicapas de polímeros conductores consisten en una serie de films superpuestos a partir de dos polímeros conductores distintos. Cada film se forma capa a capa, alternando varias celdas electrolíticas, una por cada polímero a depositar. Se ha comprobado que el área de oxidación y reducción de las ciclovoltamperometrías de los sistemas multicapa es notablemente mayor que la suma de las áreas de las ciclovoltamperometrías de los films de los monómeros de cada uno de los homopolímeros que lo forman (Estrany Coda et al. 2011).

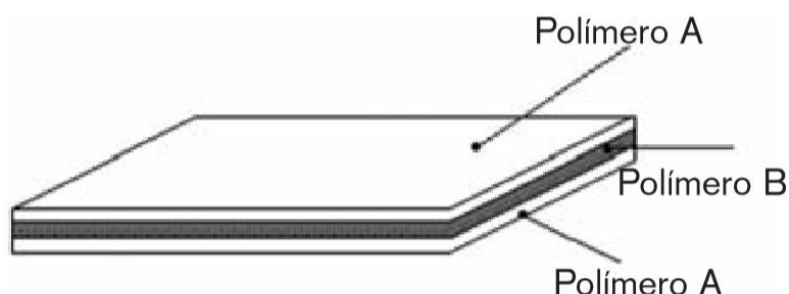


Figura 11. Sistema multicapa compuesto por dos polímeros distintos A y B (Fuente: Estrany Coda et al. 2011).

Para asegurarse que la superficie de cada capa no se vea modificada durante la formación de la siguiente que queda superpuesta, ambas capas han de poder generarse al mismo potencial, como es el caso de los films de PEDOT, PNMePy y P(EDOT-co-NMePy).

Se ha demostrado que un sistema multicapa PEDOT-PNMePy-PEDOT de tres, cinco o siete films superpuestos son mucho más electroactivos que un film compuesto de un único polímero (PEDOT) (Estrany Coda et al. 2011) de peso similar. Este mismo estudio también ha demostrado que el incremento de electroactividad de cinco a siete capas es marginal, por lo que se consideran los sistemas de tres y cinco capas como una buena elección.

Los compuestos multicapa PEDOT-PNMePy se han estudiado como aditivo en forma de partículas epoxi debido a su resistencia a la corrosión (Jiménez 2017).

La Figura 12 muestra una ciclovoltamperometría de control de un sistema de nueve capas alternadas de PEDOT y PNMePy. En él se demuestra la gran estabilidad de los sistemas multicapa, mayor que los films de PEDOT homopolímero con mismo tiempo de generación ya que pese a oxidarlo hasta dos

voltios, las áreas de oxidación y reducción se mantienen tras muchos ciclos redox consecutivos (UPC, n.d.).

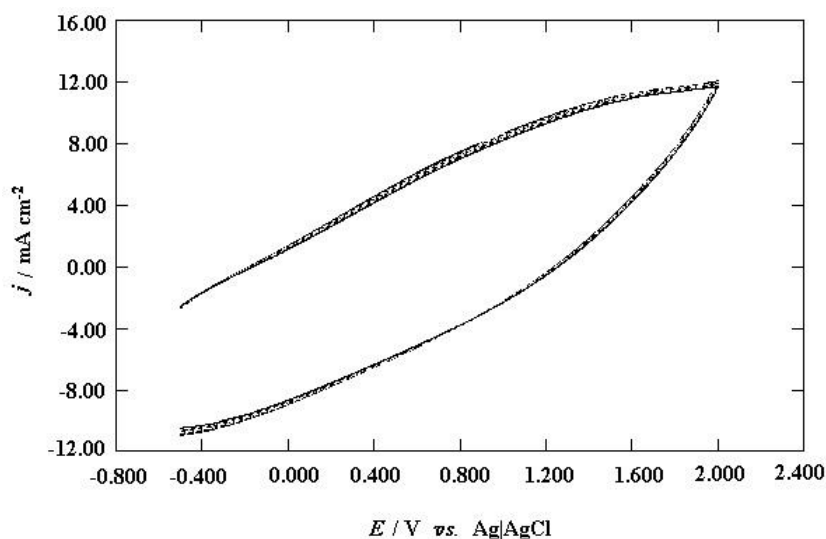


Figura 12. Ciclovoltamperometría de control a 2 V para un sistema de 9 capas (Fuente: UPC, n.d.).

El uso del microscopio electrónico de barrido (SEM) ha demostrado que el tamaño de poro es mayor en el film multicapa que en el compuesto homopolímero. Este resultado es coherente con la mayor electroactividad de las multicapas, apoyando la hipótesis que la movilidad de los aniones a través de la interfase es el factor que controla su incorporación al polímero (Estrany Coda et al. 2011).

3.2.8. Interfase nanoperforada

El objetivo principal de los nanoporos introducidos en el film es aumentar el área superficial del capacitador sin cambiar sus dimensiones (Simon and Burke 2008). El aumento de área superficial resultante repercute directamente en un aumento de la capacitancia (ecuación 3.15).

Por este motivo, los carbonos activados son muy estudiados como electrodos de almacenamiento en supercondensadores debido a su capacidad para almacenar grandes cargas eléctricas en su estructura porosa con una superficie específica superior a 1000 m²/g (Bakhmatyuk et al. 2007).

Los nanoporos pueden formarse de varios métodos: mediante termólisis, mediante adición y posterior eliminación de un copolímero en bloque (C. Wang, Wang, and Wang 2013), mediante la aplicación de ácidos (Bourzac 2009) o anodizando un material metálico (Evans 2009) entre otros.

El método utilizado en este proyecto es similar al de eliminación de un copolímero en bloque. En este caso se añade una interfase salina entre las capas del film y se disuelve posteriormente mediante inmersión en agua, obteniendo así los nanoporos.

3.2.9. Capacitadores

Un capacitor o condensador eléctrico es un elemento pasivo cuya función principal es almacenar y suministrar cargas eléctricas. Los condensadores tienen muchas aplicaciones importantes en electrónica, como el almacenamiento de energía potencial eléctrica, el retraso de los cambios de voltaje (cuando se combina con resistencias), la filtración de señales de frecuencia no deseadas, la formación de circuitos resonantes y la creación de divisores de voltaje (MIT 2018).

El capacitor más sencillo consta de dos placas enfrentadas en influencia total, en el que todas las líneas de campo eléctrico que parten de una van a parar a la otra, separadas por un aislante polarizable llamado dieléctrico, o por el vacío. Algunos materiales dieléctricos son el aire, el papel, la cerámica, la mica o el plástico (Clae 2012).

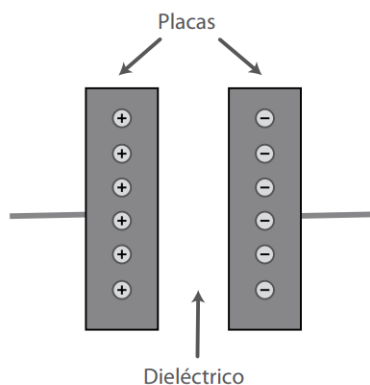


Figura 13. Representación de un condensador de placas paralelas (Fuente: Saucedo 1010).

En el estado de descarga, la carga de cada una de las placas conductoras es de cero. Durante el proceso de carga, una carga Q circula de una placa a la otra, resultando en una placa cargada positivamente ($+Q$) y la otra negativamente ($-Q$). El hecho de que el material dieléctrico sea polarizable indica que sus moléculas al estar en un campo eléctrico se orientan en forma de dipolos de manera que el polo negativo se ve atraído por la placa cargada positivamente y viceversa. Las placas se van llenando de cargas positivas y negativas respectivamente hasta alcanzar el potencial de la fuente, y en el caso de que la tensión de la fuente disminuya, el condensador puede ceder sus cargas para igualar la tensión.

Las curvas de carga en función del tiempo son exponenciales, el valor de la carga en un determinado instante se puede obtener aplicando la ecuación 3.14, donde R es la resistencia y C es la capacitancia.

$$Q = C V \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}} \right) \quad (\text{Ec. 3.14})$$

La capacitancia es una constante proporcional que mide la capacidad de almacenar carga eléctrica para una diferencia de potencial (ΔV) dada.

$$C = \frac{Q_1}{V_1 - V_2} = \frac{Q_2}{V_2 - V_1} \quad (\text{Ec. 3.15})$$

La unidad de la capacitancia es el faradio (F) equivalente a un culombio por voltio (C/V). La capacidad de un condensador puede variar en función de:

- La distancia de las placas.
- El número de placas.
- El dieléctrico.
- La temperatura, un aumento de temperatura disminuye la capacidad.

En el caso descrito de placas paralelas, se puede calcular el valor de la capacitancia mediante la ecuación 3.16, donde A es el área superficial de las placas separadas por la distancia d y ϵ , es la permitividad eléctrica del dieléctrico.

$$C = \frac{Q}{|\Delta V|} = \frac{\epsilon A}{d} \quad (\text{Ec. 3.16})$$

La permitividad de un material suele darse en relación a la del vacío (ϵ_0), esta permitividad se denomina permitividad relativa (ϵ_r) y se relaciona con la absoluta (ϵ) con la ecuación 3.17 donde χ_e es la susceptibilidad eléctrica del material.

$$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0 = (1 + \chi_e) \epsilon_0 \quad (\text{Ec. 3.17})$$

Obviamente, la ecuación 3.16 no es válida para otros tipos de capacitadores, por ejemplo, en un condensador cilíndrico coaxial de radios a y b, de una longitud L la ecuación a aplicar es la 3.18, donde λ es la carga por unidad de longitud (Q/L).

$$C = \frac{Q}{|\Delta V|} = \frac{\lambda L}{\lambda \ln(b/a)/2\pi \epsilon_0} = \frac{2\pi \epsilon_0}{\ln(b/a)} \quad (\text{Ec. 3.18})$$

Ambas ecuaciones provienen de 3.19, donde aplicando la Ley de Gauss para estudiar el flujo de campo eléctrico que atraviesa una superficie, podemos obtener la ecuación necesaria para obtener el valor de capacitancia para cualquier disposición de placas.

$$\oiint \vec{E} \cdot d\vec{A} \quad (\text{Ec. 3.19})$$

Cuando se conectan capacitores en paralelo, la capacitancia resultante es igual a la suma de las capacitancias de todos los capacitores (Ec 3.20), mientras que si se conectan en serie la inversa de la capacitancia es igual a la suma de las inversas de todas las capacitancias (Ec 3.21).

$$\text{Serie: } \frac{1}{C_{AB}} = \frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2} + \dots + \frac{1}{C_n} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{C_k} \quad (\text{Ec. 3.20})$$

$$\text{Paralelo: } C_{AB} = C_1 + C_2 + \dots + C_n = \sum_{k=1}^n C_k \quad (\text{Ec. 3.21})$$

Para determinar la energía acumulada en un condensador basta con tener en cuenta su capacidad y la tensión a la que se está alimentando.

$$\varepsilon = \int_{q_1}^{q_2} V dq = \int_{q_1}^{q_2} \frac{Q}{C} dq = \frac{Q^2}{2C} = \frac{1}{2C} (C(V_2 - V_1))^2 = \frac{1}{2} C(V_2 - V_1)^2 \quad (\text{Ec. 3.22})$$

3.2.10. Supercapacitores

Los supercapacitores (o supercondensador) electroquímicos surgen como puente entre baterías y capacitadores. Su construcción y funcionamiento es similar a la de un condensador convencional a gran escala pero con un tamaño inferior. Un supercondensador puede llegar a tener capacidades del orden de miles de faradios y se caracterizan por poder ser cargados y descargados en brevísimos periodos de tiempo, por lo que son apropiados para responder ante interrupciones de suministro de corta duración (Gil Mera 2009).

Las principales ventajas de los supercondensadores frente a las baterías son:

- Mayor facilidad para ceder potencial.
- Rapidez de carga y descarga.
- Elevado número de ciclos de vida.
- Mayor resistencia a temperaturas adversas.
- No presentan elementos tóxicos en su composición comunes en las baterías.
- Menor necesidad de mantenimiento.

En cambio, sus principales desventajas son:

- Capacidad de almacenar energía limitada (Ec 3.22).
- Coste económico.

Los supercapacitores electroquímicos suelen dividirse en dos tipos, condensadores electroquímicos de doble capa y pseudocapacitores. En los condensadores electroquímicos de doble capa la capacitancia surge de la acumulación de carga en la interfaz electrodo / electrolito y están fabricados principalmente con especies carbonáceas.

Por otro lado, los pseudocapacitores se basan en reacciones redox rápidas y reversibles en la superficie de los materiales electroactivos, y en general, su capacitancia es mucho más alta que la de los condensadores electroquímicos de doble capa. Los óxidos de metales de transición y los polímeros conductores se usan comúnmente como materiales de electrodo para pseudocondensadores (Borras, Estrany, and Alemán 2017).

3.2.11. Microscopía electrónica de barrido (SEM)

La microscopía electrónica de barrido (SEM) es una técnica no destructiva utilizada en la caracterización morfológica de materiales. A diferencia de la microscopía óptica que usa la luz visible, esta utiliza un haz de electrones que interactúan con la muestra generando imágenes de alta resolución a escalas más pequeñas.

Todo microscopio electrónico de barrido basa su funcionamiento en tres ejes fundamentales, una fuente de electrones que ilumina la muestra, unas lentes electromagnéticas que dirigen el haz hacia la muestra de la manera más conveniente y de un sistema que capta los efectos del haz al incidir en la muestra y los visualiza (SCAI 2018).

Los electrones generados pueden ser obtenidos por mediante diferentes tipos de fuentes que repercutirán en el tipo de haz producido. Una vez libres, los electrones son acelerados sometidos a una gran diferencia de potencial eléctrico. Los tres tipos de fuentes de energía más comunes son:

- **Filamento de tungsteno:** Los electrones son expelidos por calentamiento, produce un haz de mayor tamaño y corta duración. Es la fuente más económica.
- **Filamento de hexaboruro de lantano:** Los electrones son expelidos por calentamiento, produce un haz de mayor duración y más fino.
- **Emisor de efecto de campo:** Los electrones son extraídos por un intenso campo eléctrico, produce el haz más fino, pero es la fuente más cara.

Las lentes electromagnéticas se encargan de modelar los electrones acelerados. Estas lentes están dispuestas en serie y cada una tiene una función diferente:

- **Lentes condensadoras:** Definen el tamaño del haz y el nivel de convergencia.
- **Lentes objetivo:** Se usan para enfocar y determinan el diámetro final del haz de electrones, formando la imagen inicial de la muestra.

Junto a las lentes también existen diversas bobinas electromagnéticas que ayudan a desplazar el haz.

Finalmente, al incidir el haz de electrones sobre la muestra se producen una serie de efectos que son captados y visualizados:

- **Electrones secundarios:** Se producen cuando el haz pasa cerca del núcleo de un átomo superficial, proporcionando suficiente energía para que salten fuera de la muestra.
- **Electrones retrodispersados:** Se producen cuando un electrón del haz choca con un núcleo de un átomo de la muestra siendo repelidos en sentido contrario. Cuanta mayor densidad tenga la superficie de la muestra, más electrones retrodispersados serán repelidos.
- **Rayos X:** Cuando un electrón secundario es expulsado del átomo, otro más externo puede saltar para rellenar ese hueco. El exceso de energía provocado puede ser balanceado mediante la emisión de rayos X característicos de cada elemento de la muestra.
- **Electrones Auger:** En el proceso descrito anteriormente, el desplazamiento de electrones puede ser corregido emitiendo un nuevo electrón de la capa más externa, denominado electron Auger que nos revela información sobre la composición de pequeñas partes de la muestra.

Si la muestra utilizada es muy fina, también se pueden obtener otros tipos de señales que aportarán información extra de su morfología provenientes de electrones que han atravesado la muestra.

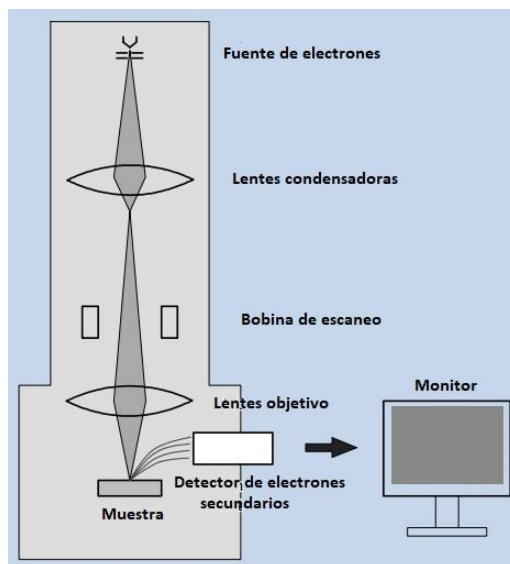


Figura 14. Representación esquemática de las partes de un microscopio electrónico de barrido (Fuente: JEOL 2006).

3.2.12. Microscopía de fuerzas atómicas (AFM)

El microscopio de fuerza atómica (AFM) es un instrumento mecano-óptico capaz de detectar fuerzas del orden de los nanonewton. Se basa en la detección de las fuerzas entre los átomos de la superficie de la muestra y una punta situada en un cantiléver que rastrea la superficie.

El principio de funcionamiento de un AFM es la ley de Hooke, en la que la compresión del cantiléver (Δz) con una constante elástica k_z , es una medida directa de la fuerza aplicada (López and Solares 2014).

$$\bar{F} = k_z \Delta \bar{z} \quad (\text{Ec. 3.23})$$

Un haz de luz láser está en contacto en todo momento con el cantiléver, la luz reflejada llega a un fotodetector de cuatro cuadrantes que permite traducir la desviación del cantiléver en una señal.

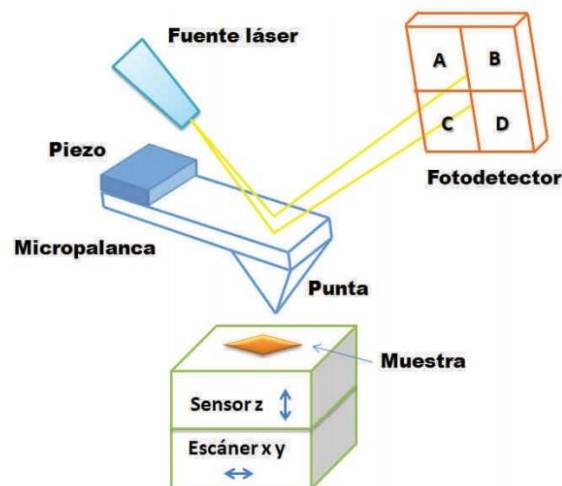


Figura 15. Partes de un microscopio de fuerzas atómicas (Fuente: López and Solares 2014).

El AFM puede funcionar en distintos esquemas o arreglos experimentales:

Contacto: La punta se sitúa a una distancia inferior a 5 Å y la fuerza producida se mantiene constante. Es el método más usado debido a su rapidez.

No contacto: La punta se sitúa a una distancia de 50 – 100 Å de la superficie de la muestra. El cantiléver oscila a su frecuencia de resonancia cambiando su amplitud cuando detecta un cambio en la superficie.

Contacto intermitente: La punta se mantiene en contacto con la superficie de manera discontinuada. El cantiléver oscila a una frecuencia constante cercana a la de resonancia.



Figura 16. Representación de los tres métodos de trabajo del AFM (Fuente: Collins 2016).

Las principales ventajas y desventajas de estos métodos se resumen en la siguiente tabla (Crespo 2013).

Tabla 3. Ventajas y desventajas de los tres modos de trabajo de un AFM.

Modo de trabajo	Ventajas	Inconvenientes
Contacto	<ul style="list-style-type: none"> • Rapidez • Buena resolución atómica 	<ul style="list-style-type: none"> • Las fuerzas laterales pueden distorsionar la imagen • Fuerzas normales fuertes • Puede dañar las muestras blandas
No contacto	<ul style="list-style-type: none"> • No se aplica fuerza sobre la muestra • Útil para muestras hidrofóbicas 	<ul style="list-style-type: none"> • Menor resolución lateral • Menor velocidad de barrido
Contacto intermitente	<ul style="list-style-type: none"> • Mayor resolución lateral • Menor interacción con la muestra 	<ul style="list-style-type: none"> • Menor velocidad de barrido

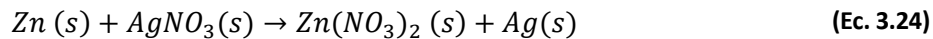
3.3. Electroquímica

La electroquímica es el estudio de los procesos químicos que causan un movimiento de electrones denominado electricidad. Las reacciones que causan este movimiento se denominan reacciones de oxidación-reducción o redox.

Las reacciones redox son aquellas que implican un cambio en el estado de oxidación de uno o más elementos. Cuando una sustancia pierde un electrón su estado de oxidación aumenta, por lo que se está oxidando. Cuando una sustancia gana un electrón, su estado de oxidación disminuye por lo que se reduce.

Se denomina oxidante a aquella sustancia que provoca la oxidación de otra, y por lo tanto se reduce en el proceso. Las sustancias que provocan la reducción de otras y que se oxidan en el proceso se denominan reductoras.

Un ejemplo claro de este tipo de reacciones es la del zinc con el nitrato de plata, la reacción global es la siguiente:



Los estados de oxidación para cada una de los átomos involucrados en la reacción han cambiado de la siguiente manera:

Tabla 4. Estados de oxidación de los elementos de la ecuación 3.24.

Compuesto	Nº de oxidación inicial	Nº de oxidación final
Zinc ($\text{Zn} \rightarrow \text{Zn(NO}_3)_2$)	0	+2
Plata ($\text{AgNO}_3 \rightarrow \text{Ag}$)	+1	0

La plata disminuye su número de oxidación por lo tanto se reduce, mientras que el zinc se oxida ya que aumenta su número de oxidación. Las semirreacciones correspondientes son:



3.3.1. Celdas electroquímicas

Las celdas o pilas electroquímicas son los recipientes donde las reacciones electroquímicas tienen lugar. Estas celdas pueden ser:

- **Celdas galvánicas o voltaicas:** Transforman la energía química de las reacciones en energía eléctrica. Estas celdas suelen estar formadas por el ánodo donde se produce la oxidación y el cátodo donde se produce la reducción conectados por un conductor que permita la circulación de los electrones. Ambos electrodos están sumergidos cada uno en una disolución que contiene una sal disuelta del metal correspondiente, separados entre sí por un puente salino o membrana porosa que permita la difusión de iones.

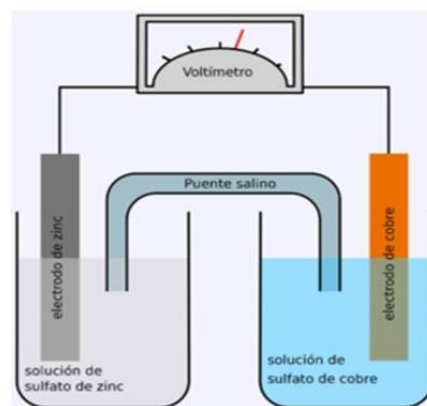


Figura 17. Esquema de una celda galvánica con puente salino de cobre y zinc (Fuente: Borneo 2018).

- **Celdas electrolíticas:** Transforman la energía eléctrica en energía química. En estas celdas se produce la electrolisis, proceso en el cual un compuesto químico se descompone en sus elementos más simples por la acción de una corriente eléctrica. Estas celdas están formadas por tres electrodos conectados a un potencióstato (trabajo, contraelectrodo y referencia) en una disolución adecuada de electrolito. Este tipo de celda es donde se producirá la electrogeneración del PEDOT así como del copolímero en este proyecto.

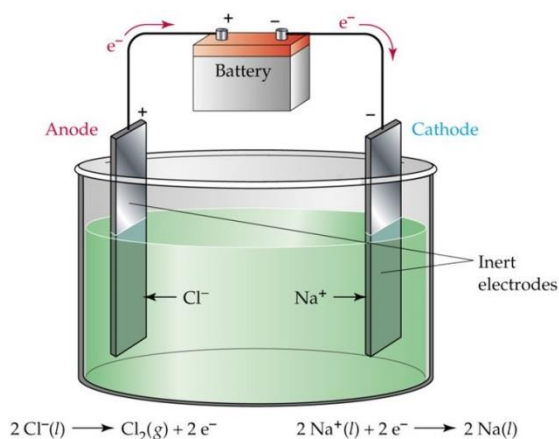


Figura 18. Esquema de una celda electrolítica en la electrolisis del NaCl (Fuente: García 2018).

Durante la elaboración del proyecto se ha hecho uso de una celda de vidrio topacio de cinco bocas con camisa exterior para circuito termostático, durante la experimentación se procura que todas las aperturas estén bien tapadas para evitar en todo lo posible el paso de oxígeno.

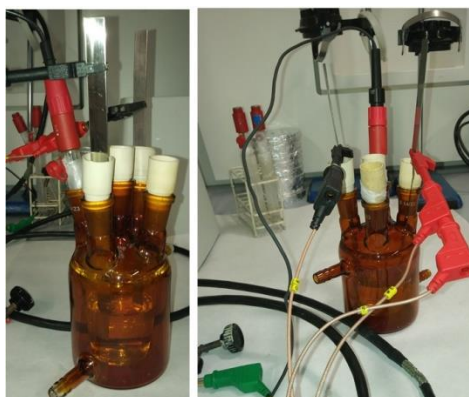


Figura 19. Celda electroquímica con conexiones preparada para generar la primera capa de PEDOT.

3.3.2. Electrodos

Un electrodo es un conductor eléctrico utilizado para hacer contacto con una parte no metálica de un circuito. En la electroquímica se distinguen dos tipos de electrodos, el cátodo en el que se produce la reducción y el ánodo donde se produce la oxidación.

En este proyecto se distinguen tres tipos de electrodos:

- **Electrodo de trabajo:** Es el electrodo donde se producirá la electrogeneración del polímero. Este electrodo actúa como ánodo y por lo tanto se conectará al polo positivo del potencióstato. Este electrodo consiste en una lámina de acero inoxidable.
- **Contraelectrodo:** Es el electrodo necesario para cerrar el circuito. Este electrodo actúa como cátodo y por lo tanto se conectará al polo negativo del potencióstato. Al igual que el electrodo de trabajo, este electrodo consiste en una lámina de acero inoxidable.
- **Electrodo de referencia:** Este electrodo tiene un potencial conocido y constante y no participa en las reacciones que se producen en la celda. Se utiliza para medir el potencial entre el electrodo de trabajo y el contraelectrodo. Es un electrodo de Ag/AgCl que contiene una solución acuosa saturada de KCl ($E^0 = 0,222 \text{ V}$ vs electrodo estándar de hidrogeno a 25°C).

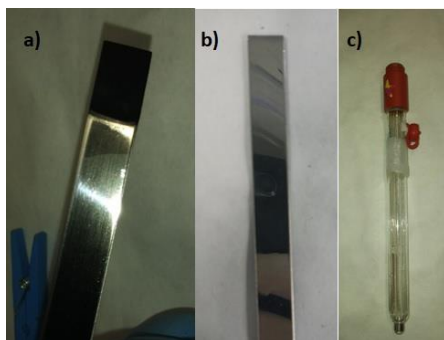


Figura 20. a) Electrodo de trabajo con polímero generado b) Contraelectrodo c) Electrodo de referencia.

Los electrodos utilizados en este proyecto son placas de acero inoxidable AISI 316 de 1 x 15 cm. Los aceros inoxidables son aleaciones de hierro con un mínimo de un 10,5% de cromo. Sus características se obtienen mediante la formación de una película adherente e invisible de óxido de cromo. La aleación 316 es un acero inoxidable austenítico de uso general con una estructura cúbica de caras centradas. Es esencialmente no magnético en estado recocido y sólo puede endurecerse en frío. Se añade molibdeno para aumentar la resistencia a la corrosión especialmente en entornos que contienen cloruros (Goodfellow 2018).

3.3.3. Potenciostato-galvanostato

El potenciostato-galvanostato es el dispositivo electrónico necesario para controlar una celda electroquímica. Sus dos funciones principales son (Ortiz Fuentes 2013):

- Controlar la diferencia de potencial entre el electrodo de trabajo y el de referencia.

- Controlar la intensidad de corriente que circula entre el contraelectrodo y el electrodo de trabajo.

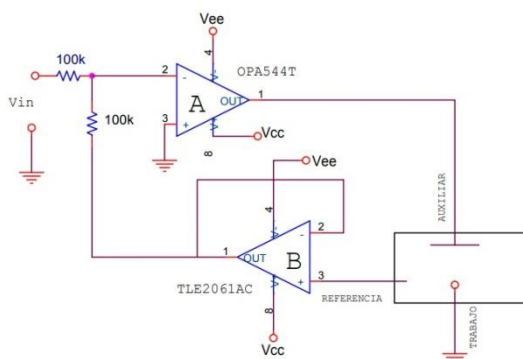


Figura 21. Esquema eléctrico de un potenciostato sencillo (Fuente: Calabozo et al. 2013).

Se ha utilizado el potenciostato PGSTAT101 de Metrohm Autolab, localizado en el laboratorio de síntesis de la EEBE. Este modelo consta de cuatro salidas, tres para las conexiones a los electrodos y una última como conexión a tierra.



Figura 22. Potenciostato PGSTAT101 de los laboratorios de la EEBE.

3.3.4. Ordenador con software NOVA 2.1.

El ordenador se usa para controlar los parámetros de la reacción a través del software NOVA 2.1 de la compañía Metrohm Autolab y del potenciostato PGSTAT101 de la misma compañía. Los resultados obtenidos se visualizan a través de este mismo programa, que además permite extraer los datos a Excel para su posterior procesado.

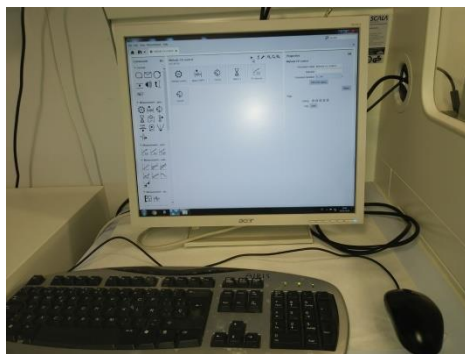


Figura 23. Ordenador de los laboratorios de la EEBE con software NOVA 2.1.

3.4. Métodos electroquímicos

3.4.1. Voltamperometría de barrido lineal

La voltamperometría de barrido lineal o LSV (linear sweep voltammetry) es un método electroquímico usado para estudiar la cinética de transferencia de electrones así como las propiedades de transporte en las reacciones de electrolisis.

En las LSV se emplea un rango de potencial fijo en el que el voltaje se escanea desde un límite inferior a uno superior a velocidad constante como se muestra en la figura (Figura 24a). Los resultados de las LSV se representan mediante la corriente obtenida en función del potencial aplicado (Figura 24b).

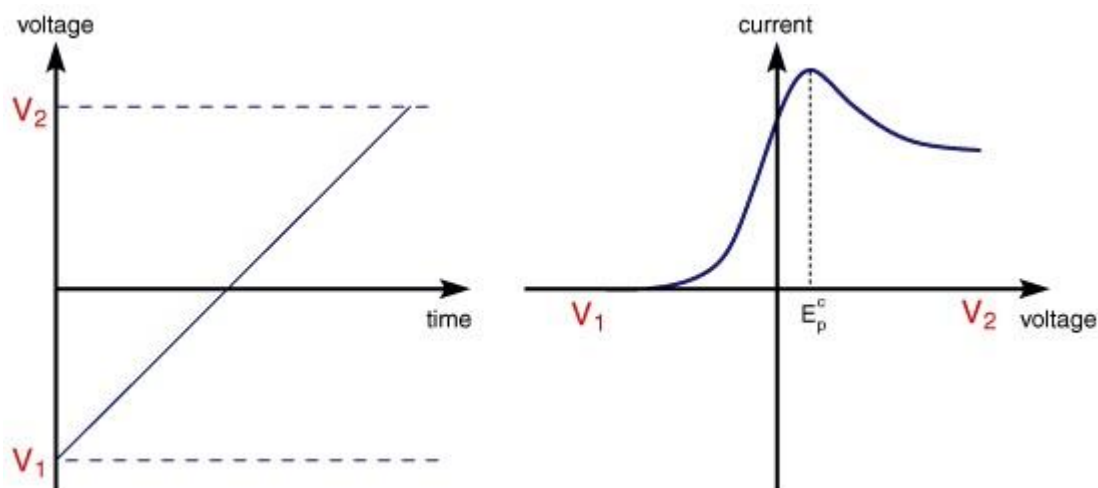


Figura 24. Ejemplo de voltamperometrías de barrido lineal a) Potencial (V) vs Tiempo (s). b) Intensidad (A) vs Potencial (V) (Fuente: University of Cambridge 2018).

3.4.2. Ciclovoltamperometría

La ciclovoltamperometría (CV) es una técnica electroquímica potente y popular usada comúnmente para investigar los procesos de oxidación y reducción de una especie molecular (Elgrishi et al. 2017). Esta técnica mide la corriente que se desarrolla en una celda electroquímica en condiciones en las que el voltaje es superior al previsto por la ecuación de Nernst (Ec 3.27).

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q \quad (\text{Ec. 3.27})$$

En la CV, al igual que en la LSV, se emplea un rango de potencial fijo, sin embargo al llegar al límite superior, el voltaje se invierte hasta alcanzar el valor inicial. En el caso de los polímeros conductores, el potencial que suele aplicarse va desde un valor negativo a uno positivo ya que la formación del film tiene lugar por oxidación sobre el electrodo.

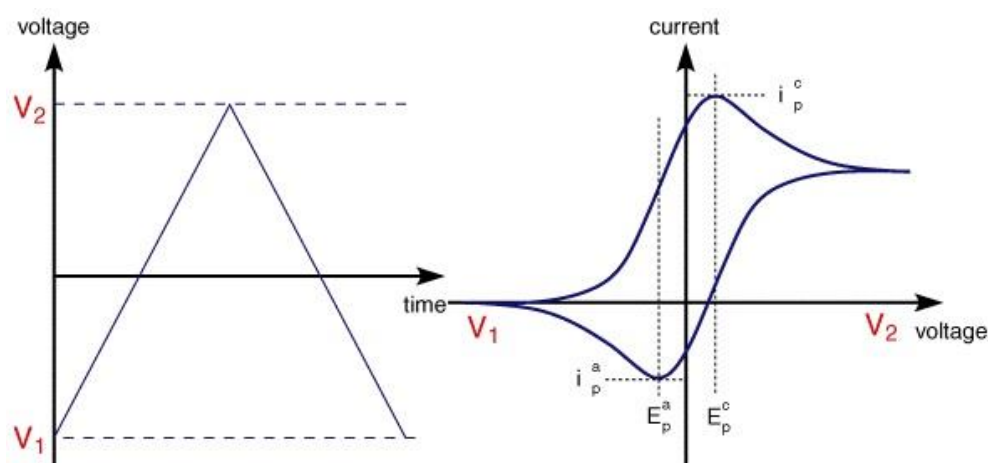


Figura 25. Ejemplo de ciclovoltamperometría a) Potencial (V) vs Tiempo (s). b) Intensidad (A) vs Potencial (V) (Fuente: University of Cambridge 2018).

El área superior del gráfico (Figura 25b) en la que aumenta el potencial corresponde con la carga de oxidación, mientras que la sección inferior corresponde a la carga de reducción de la especie estudiada.

La función principal de este proceso es evaluar la estabilidad de la batería a lo largo de los ciclos de carga y descarga de la batería.

3.4.3. Cronopotenciometría

La cronopotenciometría (CP) es método electroquímico más básico, en ella un pulso de corriente se aplica al electrodo de trabajo y su potencial resultante se mide contra un electrodo de referencia en función del tiempo.

En el momento en el que se aplica la corriente se produce un cambio de potencial brusco debido a la pérdida de iR (caída de voltaje en la componente resistiva de la impedancia). A continuación el voltaje varía gradualmente debido a que se desarrolla un sobrepotencial de concentración a medida que el reactivo se agota en la superficie del electrodo. Si la corriente es mayor que la corriente límite, el flujo de corriente requerido no podrá ser proporcionado y por lo tanto el potencial aumentará rápidamente (Pyun et al. 2012).

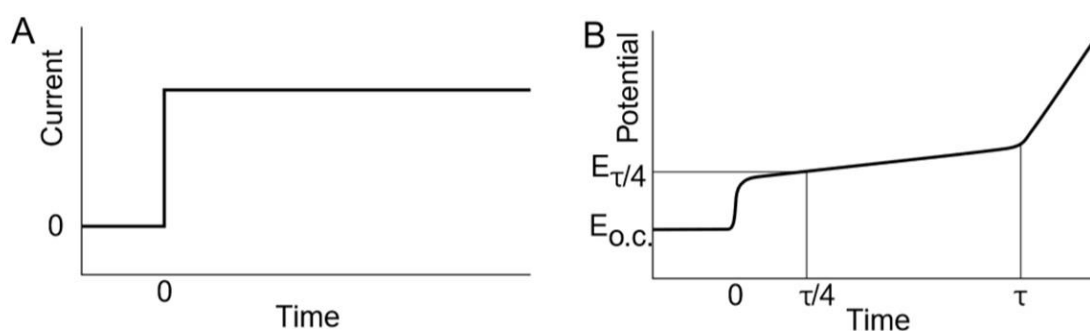


Figura 26. Ejemplo de cronopotenciometrías a) Intensidad (A) vs Tiempo (s) b) Potencial (V) vs Tiempo (s).
(Fuente: Bott 2000).

La forma de la cronopotenciometría dependerá de las concentraciones del oxidante y del reductor en la superficie del electrodo durante el proceso. El tiempo requerido para que la concentración del reactivo en la superficie del electrodo se agote se caracteriza por el tiempo τ . La magnitud de τ depende de la corriente aplicada, un aumento en la corriente implica una disminución de τ . Esta relación cuantitativa se define mediante la ecuación de Sand (Ec 3.28) (Bott 2000) :

$$i\tau^{1/2} = \frac{nFAC\pi^{1/2}D^{1/2}}{2} \quad (\text{Ec. 3.28})$$

Donde A es el área de la superficie del electrodo, C es la concentración del analito y D es su coeficiente de difusión. El parámetro de diagnóstico $i\tau^{1/2}$ es útil para caracterizar CPs ya que es constante para los procesos redox sencillos.

3.4.4. Cronoamperometría (CA)

La cronoamperometría (CA) es un método electroquímico en el que el electrodo de trabajo se somete a un cambio de potencial instantáneo. El potencial cambia bruscamente de E_1 , donde el electrodo se encuentra generalmente en equilibrio, a E_2 y la variación de corriente resultante se registra en función del tiempo.

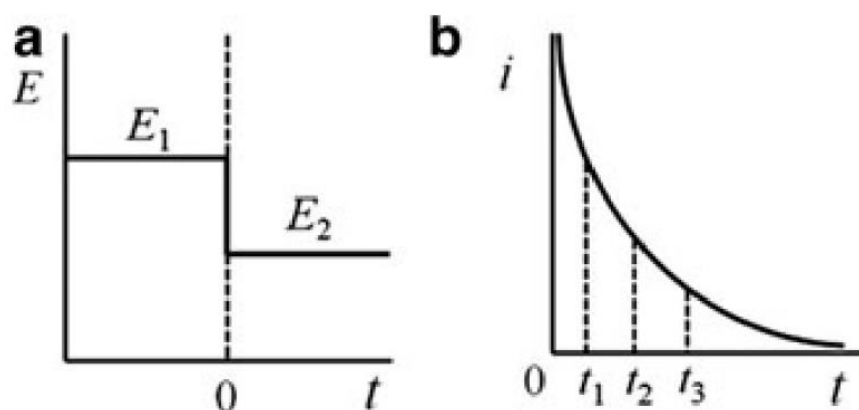


Figura 27. Ejemplo de cronoamperometría a) Potencial (V) vs Tiempo (s) b) Intensidad (A) vs Tiempo (s) (Fuente: Pyun et al. 2012).

La reacción de transferencia de carga es tan rápida que la concentración de equilibrio de la especie activa se alcanza en la superficie del electrodo en el momento del cambio de potencial. Al irse oxidando la especie su concentración disminuye al igual que la densidad de corriente hasta estabilizarse. Para un electrodo plano esta variación está definida por la ecuación de Cottrell como la suma de la corriente farádica (i_f) y la corriente capacitiva (i_c). En un equipo en buenas condiciones, la corriente capacitiva decae a 0 en menos de 50 μ s, por lo que es negligible.

Por lo tanto, la ecuación de Cottrell es la siguiente:

$$I = i_f + i_c \quad (\text{Ec. 3.29})$$

Donde la corriente farádica corresponde al siguiente término, donde n es el número de electrones, F es la constante de Faraday, A es el área del electrodo plano en cm^2 , C es la concentración inicial del analito en mol/cm^3 , D es el coeficiente de difusión de la especie en cm^2/s y t es el tiempo en segundos:

$$i_f = nFAC \left(\frac{D}{\pi t} \right)^{1/2} \quad (\text{Ec. 3.30})$$

La representación gráfica de la ecuación de Cottrell se muestra a continuación:

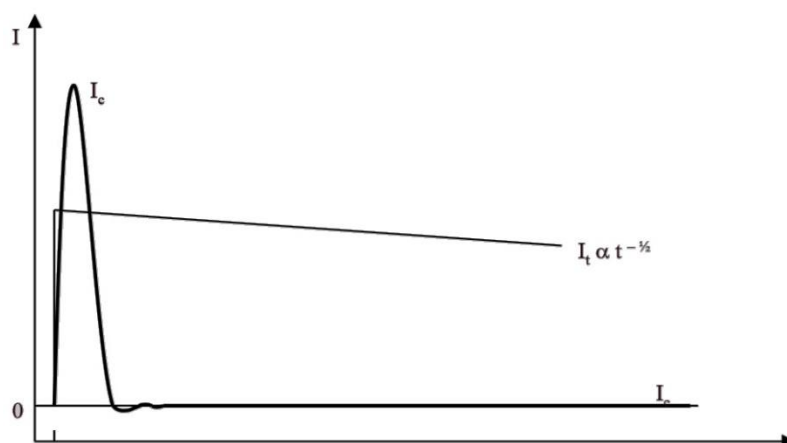


Figura 28. Representación de la corriente capacitiva (i_c) y de la corriente farádica (i_f) de la ecuación de Cottrell
(Fuente: UPC, n.d.).

La cronoamperometría es usada para generar las capas de PEDOT y de copolímero en el electrodo de trabajo.

4. Material y reactivos

4.1. Material de laboratorio

A continuación se lista el material de laboratorio usado para la elaboración del proyecto.

Tabla 5. Material de laboratorio necesario.

Material	Cantidad	Utilidad
Matraz aforado de 50 mL	2	Preparar las disoluciones de 50 mL
Pesasustancias	1	Pesar el LiClO ₄
Vaso de precipitados de 100 mL	2	Guardar CH ₃ CN y Preparar la disolución de agua con sal al 20%
Vaso de precipitados de 500 mL	1	Limpiar electrodos
Celda electrolítica	2	Electrogenación de polímeros y pruebas electroquímicas
Lamina de acero inoxidable AISI 316 1x15 cm	8	Usar de electrodos de trabajo y contraelectrodo
Electrodo de referencia de AgCl en KCl	1	Controlar potencial entre el electrodo de trabajo y el contraelectrodo
Burbujeador de gas inerte de vidrio	1	Burbujear N ₂ a la celda electroquímica
Espátula	1	Pesar el LiClO ₄
Balanza analítica	1	Pesar el LiClO ₄
Ordenador con software NOVA 2.1	1	Controlar los procedimientos electroquímicos
Pipeta Pasteur	1	Enrasar
Micro pipeta 10-100 µL	1	Medir el PEDOT y NMePy
Potenciostato	1	Efectuar los procedimientos electroquímicos
Cables y pinzas	3	Conectar la celda al potenciostato
Pinzas de madera	8	Almacenar las placas
Tubos de ensayo	8	Almacenar las placas
Gradilla para tubos de ensayo	1	Almacenar las placas
Pipeta graduada de 50 mL	1	Preparar la disolución de agua con sal al 20%
Frasco de vidrio	1	Guardar la disolución de agua con sal al 20%

4.2. Reactivos

Los compuestos químicos utilizados en la elaboración del proyecto son los siguientes.

- Agua destilada
- Acetonitrilo
- Perclorato de litio
- 3,4-Etilendioxitiofeno o EDOT
- Pirrol
- Acetona
- Etanol
- Cloruro de sodio

A continuación se detallan algunos aspectos de estos compuestos así como la función que han tenido en la elaboración del proyecto. Las fichas de seguridad necesarias se encuentran en el Anexo A: Fichas de seguridad.

4.2.1. Agua destilada

El agua es un líquido transparente, inodoro e insípido esencial para la mayoría de seres vivos, además de ser un excelente solvente polar. El agua destilada es aquella en la que se han eliminado la mayoría de impurezas como sales o cualquier tipo de microorganismo mediante destilación.

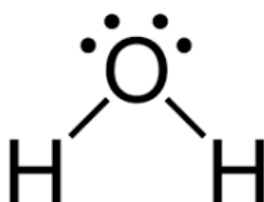


Figura 29. Formula molecular del agua.

En este estudio el agua destilada ha sido usada para los siguientes procesos:

- Limpieza del material de laboratorio.
- Preparar la disolución con sal para obtener la interfase salina mediante inmersión.
- Disolver la interfase salina para formar la interfase nanoperforada.

Tabla 6. Propiedades del agua destilada.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
H ₂ O	18,02 g/mol	999,9 g/cm ³	100 °C	0 °C	-

4.2.2. Acetonitrilo

El acetonitrilo es un líquido aromático orgánico incoloro, obtenido principalmente como subproducto en la fabricación de acrilonitrilo. Se utiliza como disolvente aprótico polar en síntesis orgánica, en la producción de butadieno y en la fabricación baterías de litio.

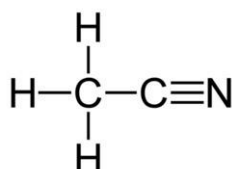



Figura 30. Formula molecular del acetonitrilo (Fuente: Premium Solvents LLC 2018).

Durante este proyecto, el acetonitrilo se ha usado como disolvente en la celda, así como para conservar las placas generadas.

Tabla 7. Propiedades del acetonitrilo.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
CH ₃ CN	41,053 g/mol	0,783 g/cm ³	82 °C	-45 °C	

La inhalación de acetonitrilo produce irritación de las membranas mucosas y una exposición a largo plazo produce efectos en el sistema nervioso central como dolores de cabeza, temblores y entumecimiento. La EPA (Environmental Protection Agency) ha clasificado este compuesto como grupo D, no cancerígeno.

4.2.3. Perclorato de litio

El perclorato de litio es una sal neutra con alta solubilidad, encuentra su uso como electrolito para baterías de litio-azufre, como fuente de oxígeno en algunas reacciones inorgánicas o como solvente para obtener combustible de forma más sencilla y barata (Cheng and Tuli 2014).

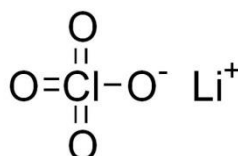



Figura 31. Estructura molecular del perclorato de litio (Fuente: Axiom Chemicals Private Limited 2018).

En este proyecto el perclorato de litio ha sido usado como agente dopante en la síntesis del polímero así como de electrolito en las pruebas electroquímicas.

Tabla 8. Propiedades del perclorato de litio.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
LiClO_4	106,386 g/mol	2,42 g/cm ³	430 °C	236 °C	

4.2.4. EDOT (3,4-Etilendioxitiofeno)

El 3,4-Etilendioxitiofeno o EDOT es un monómero cíclico usado para la síntesis de polímeros conductores. Esta molécula está formada por un anillo de tiofeno unido a un grupo poliéter, se encuentra en estado líquido y presenta un color amarillento. Es un monómero electroactivo particularmente atractivo ya que está bloqueado en los dos enlaces β que se sabe que causan defectos estructurales y electrónicos en politiofenos y polipirroles (Vandesteeg 2003). Es inmiscible en agua pero sí que lo es alcoholes y éteres. Debe conservarse en la nevera.

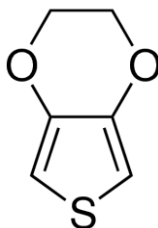



Figura 32. Formula molecular del EDOT (Fuente: Sigma-Aldrich 2018a).

Tabla 9. Propiedades del EDOT.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
$\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_2\text{S}$	142,172 g/mol	1,331 g/cm ³	193 °C	10,5 °C	

En este proyecto el EDOT ha sido utilizado para sintetizar las capas de PEDOT así como para sintetizar las capas de copolímero junto al pirrol.

4.2.4.1. N-Metilpirrol (N-MePy)

El N-metilpirrol o N-MePy es un monómero cíclico aromático heterocíclico con un grupo metilo unido al nitrógeno. Se encuentra en estado líquido y tiene un color amarillento. Es soluble en solventes orgánicos como alcoholes y demás, sin embargo es insoluble en agua. El polímero obtenido a través

de este monómero tiene una conductividad menor a la del polipirrol, esto es beneficioso en algunas aplicaciones específicas y además presenta una mayor facilidad en su tratamiento electroquímico.

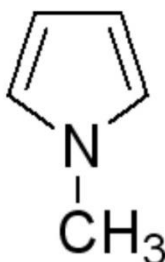


Figura 33. Formula molecular del N-metilpirrol (Fuente: Sigma-Aldrich 2018a).

Tabla 10. Propiedades del NMePy.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
C ₅ H ₇ N	81,12 g/mol	0,914 g/cm ³	113 °C	-57 °C	

En este proyecto el N-metilpirrol se ha usado para la elaboración de las capas de copolímero del capacitor.

4.2.5. Acetona

La acetona es un solvente orgánico incoloro, volátil e inflamable. Se produce naturalmente en plantas, árboles y como subproducto del metabolismo de las grasas animales así como de otros procesos. Industrialmente es obtenida de la oxidación del cumeno, de la deshidrogenación del isopropanol con catalizador metálico, la oxidación en fase vapor del butano o como subproducto en la producción de glicerol.

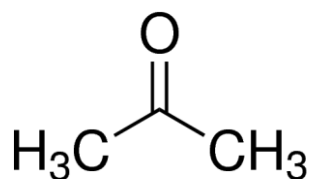




Figura 34. Formula molecular de la acetona (Fuente: Sigma-Aldrich 2018b).

Es una sustancia química comercial importante que se utiliza como disolvente en productos de consumo y en procesos industriales, así como reactivo para la fabricación de otros productos químicos como el metil metacrilato.

En este proyecto solo se ha usado la acetona como agente de limpieza.

Tabla 11. Propiedades de la acetona.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
C ₃ H ₆ O	58,079 g/mol	0,78 g/cm ³	56,05 °C	-94,7 °C	 

4.2.6. Etanol

El etanol es un alcohol obtenido de la fermentación de una amplia variedad de materiales biológicos. Es un líquido volátil e incoloro que se absorbe rápidamente en el tracto intestinal y se distribuye por todo el cuerpo. Es usado ampliamente como solvente y como desinfectante, además de ser el ingrediente principal en bebidas alcohólicas así como pinturas y perfumes entre otros. Actualmente, se está estudiando su función como combustible biodegradable de alto octanaje (Renewable Fuels Association 2015).

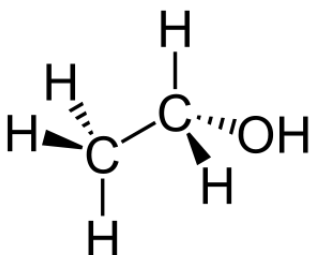




Figura 35. Formula molecular del etanol (Formula: Byju's Chemistry 2018)).

En este proyecto solo se ha usado el etanol como agente de limpieza.

Tabla 12. Propiedades del etanol.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
CH ₃ CH ₂ OH	46,069 g/mol	0,789 g/cm ³	78 °C	-114 °C	 

4.2.7. Cloruro de sodio

El cloruro de sodio es un sólido cristalino blanco usado comúnmente para sazonar los alimentos. Esta sustancia es fácilmente soluble en agua y en otros disolventes polares. Esta sal también puede ser usada como electrolito en las baterías de ion de sodio, así como antiséptico debido a su gran capacidad osmótica.

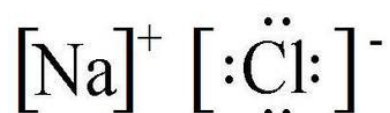


Figura 36. Estructura de Lewis del cloruro de sodio (Fuente: Khan Academy 2018).

En este proyecto el cloruro de sodio ha sido usado para formar la interfase entre las dos capas de copolímero del capacitador. Esta sal es útil para este proceso debido su facilidad para disolverse al ser sumergida en agua, permitiendo formar la interfase vacía con gran facilidad en las placas con sal disuelta.

Tabla 13. Propiedades del NaCl.

Formula molecular	Peso molecular	Densidad	Punto de ebullición	Punto de fusión	Riesgos
NaCl	58,44 g/mol	2,165 g/cm ³	1465 °C	800,7 °C	-

5. Procedimiento experimental

En este apartado se detallaran todos los pasos necesarios para desarrollar el proyecto.

5.1. Preparación del electrolito de EDOT

Se prepara una disolución de acetonitrilo de 50 mL a 0,01 M de EDOT y 0,1 M de LiClO_4 .

1. Pesar en un pesasustancias 0,534 g de LiClO_4 localizado en la estufa.
2. Medir 53,34 μL de EDOT localizado en la nevera con una micro pipeta.
3. Introducir los reactivos en un matraz aforado de 50 mL y enrasar con acetonitrilo.
4. Homogenizar la mezcla.

La disolución preparada así tiene una duración de 2.000 segundos para la electrogeneración.

5.2. Preparación del electrolito de copolímero

Se prepara una disolución de acetonitrilo de 50 mL a 0,01 M de EDOT, 0,005 M de NMePy y 0,534 g de LiClO_4 .

1. Pesar en un pesasustancias 0,534 g de LiClO_4 localizado en la estufa.
2. Medir 53,34 μL de EDOT (0,01 M) localizado en la nevera con una micro pipeta.
3. Medir 22,1 μL de NMePy (0,005 M) localizado en la nevera con una micro pipeta.
4. Introducir los reactivos en un matraz aforado de 50 mL y enrasar con acetonitrilo.
5. Homogenizar la mezcla.

La disolución preparada así tiene una duración de 2.000 segundos para la electrogeneración.

5.3. Preparación de la disolución de agua con sal al 20%

1. Pesar en un vaso de precipitados 20 g de NaCl.
2. Medir 100 mL de agua destilada con una pipeta graduada.
3. Mezclar el agua con el NaCl y agitar.
4. Guardar en un frasco de vidrio y tapar.

5.4. Preparación de los electrodos

Se limpian los electrodos a conciencia para evitar que el polímero se deposite en capas irregulares.

1. Coger la placa y retirar la protección.
2. Limpiar con agua y jabón las grandes impurezas.
3. Limpiar con agua destilada abundante, etanol, agua destilada, acetona y finalmente agua destilada.
4. Secar completamente.
5. Limpiar los electrodos después de cada uso con acetona y agua destilada.
6. Limpiar el electrodo de referencia solamente con agua destilada, secar cuidadosamente con papel y abrir el tapón de goma en el momento del uso.

5.5. Preparación de la celda

Se disponen de dos celdas, una con la disolución de EDOT y la otra con la disolución de copolímero. La atmosfera de nitrógeno aportada es de gran importancia para evitar oxidaciones involuntarias, por ello es importante mantener tapados los orificios de la celda en todo momento.

1. Tapar todos los orificios menos uno con tapones.
2. Verter el electrolito dentro de la celda y colocar el burbujeador.
3. Conectar el burbujeador con N_2 durante 10 minutos.
4. Limpiar el burbujeador con agua destilada y secar.
5. Colocar el electrodo de trabajo, el contraelectrodo y el electrodo de referencia en la celda evitando el contacto entre ellos.
6. Encender el potencióstato.
7. Encender el ordenador y abrir el software NOVA 2.1.
8. Conectar la celda con los cables y pinzas al potencióstato.
9. Realizar una ciclovoltamperometría de control (apartado 5.6).

Al final de cada sesión las celdas se limpiaran tan sólo con agua destilada abundante.

5.6. Ciclovoltamperometría de control

La ciclovoltamperometría de control se usa para comprobar que tanto el equipo y la disolución están en buenas condiciones. Se da por válida una ciclovoltamperometría de control cuando se obtiene un resultado similar al siguiente.

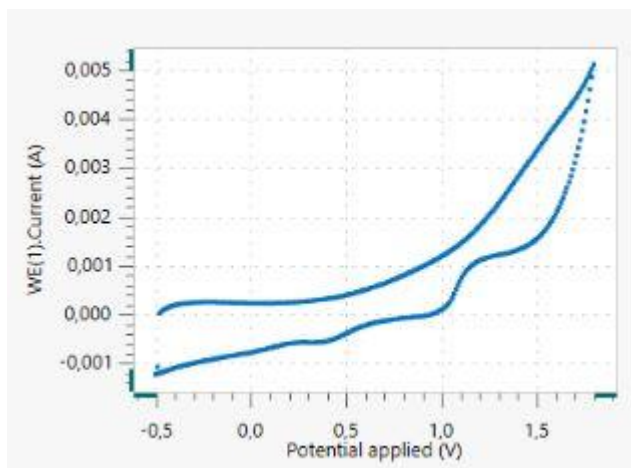


Figura 37. Resultado típico de una CV de control de una disolución de CH_3CN y LiClO_4 .

1. Seleccionar el procedimiento por defecto *Cyclic voltammetry potentiostatic* en el software NOVA.
2. Introducir los siguientes parámetros:
 Current Range: 1mA.
 Apply: -0,49 V.
 Start Potential: -0,49 V.
 Upper Vertex: 1,8 V.
 Lower Vertex: -0,5 V.
 Stop Potential: -0,49 V.
 Number of scans: 1.
 Step: 0,01.
 Record signals: a) Sampler: seleccionar WE(1). Current, WE(1). Potential, WE(1). Charge y Time.
 b) Plots: seleccionar los gráficos i vs E , i vs t y Q vs t .
3. Limpiar los electrodos como se ha descrito en el apartado 5.4.

5.7. Preparación de la multicapa

Se hace uso de una cronoamperometría para depositar cada una de las capas de polímero mientras que la capa de sal se añade mediante inmersión de la placa en una disolución de agua con sal.

Se elaborarán tres sistemas multicapas diferentes con el objetivo de poder comparar resultados. La composición de las capas se muestra en la Tabla 14. Se limpiará el contraelectrodo y el electrodo de referencia tras la generación de cada una de las capas acorde con el apartado 5.4.

Tabla 14. Composición capa a capa de los diferentes films del estudio.

Placa	Primera capa	Segunda capa	Interfase	Tercera Capa	Cuarta capa
Con sal	PEDOT	P(EDOT-co-NMePy)	Sal	P(EDOT-co-NMePy)	PEDOT
Con sal disuelta	PEDOT	P(EDOT-co-NMePy)	Interfase vacía	Copolímero (PEDOT + PNMePy)	PEDOT
Blanco	PEDOT	P(EDOT-co-NMePy)	-	P(EDOT-co-NMePy)	PEDOT

Para asegurar la reproducibilidad del resultado se generan dos réplicas de cada multicapa para cada ensayo. El hecho de que los films de PEDOT y de copolímero se puedan generar al mismo potencial, asegura que la superficie de cada capa no se vea modificada durante la formación de la siguiente que quedará superpuesta.

1. Seleccionar el procedimiento por defecto “Chrono amperometry ($\Delta t > 1\text{ms}$)” localizada en “Chrono methods”.
2. Introducir los siguientes parámetros:
Autolab control: a) Mode: Potentiostatic.
b) Current range: 10 mA.
c) Bandwidth: High stability.
Apply: 1,4 V.
Record signals: a) Sampler: seleccionar WE(1). Current, WE(1). Potential, WE(1). Charge y Time.
b) Plots: seleccionar los gráficos i vs E, i vs t y Q vs t.
c) Options: seleccionar Optimize current range, WE(1), Highest current range 10 mA, Lowest current range 100nA y introducir “Stop complete procedure when WE(1).Charge > 0,55 C” y seleccionar Only once en Cutoffs.
d) Duration: 5000 s (para asegurar que el proceso no se detenga antes de alcanzar los 0,55 C).
e) Interval time: 1 s.
3. Repetir el proceso en las mismas condiciones con la disolución de copolímero para generar la segunda capa.
4. Sumergir la placa durante 5 segundos en una disolución de agua al 20% en sal (menos en el caso de los blancos) y dejar secar.
5. Generar las capas 3 y 4 igual que las anteriores.
6. Guardar las placas resguardadas de la luz para evitar la degradación del PEDOT.

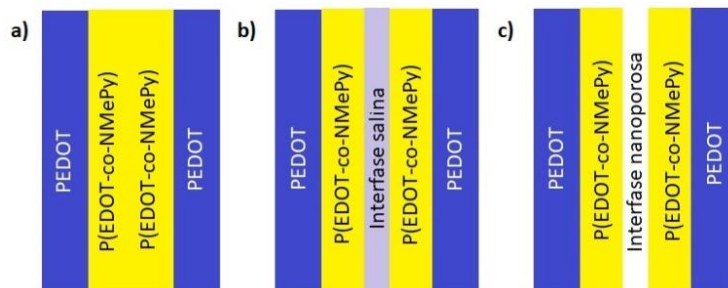


Figura 38. Representación gráfica de los films a) Blancos b) Con sal y c) Con sal disuelta.

Cada una de las placas se guardará de una forma determinada, las placas con sal se almacenarán en acetonitrilo. Las placas con sal disuelta se almacenarán en agua destilada durante un día completo con el objetivo de disolver la sal y formar nanoporos entre las dos capas de copolímero. Finalmente, los blancos se almacenarán igual que el otro tipo de placas con el que se quiera hacer la comparación.

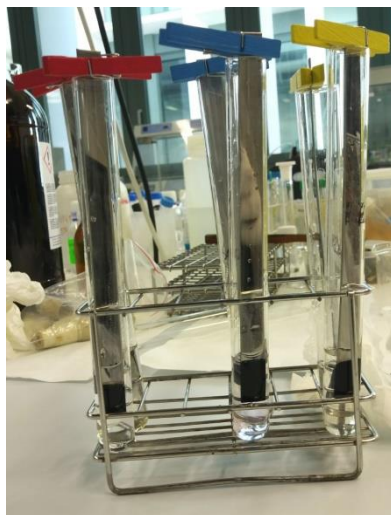


Figura 39. Gradilla con placas generadas guardadas en probetas y sujetadas con pinzas.

5.8. Ciclovoltamperometría

La disolución preparada para realizar las pruebas tan solo consiste de 0,534 g de LiClO_4 diluido en 50 mL de CH_3CN , además cada ensayo requiere de una muestra original ya que las pruebas destruyen la placa.

1. Seleccionar el procedimiento por defecto *Cyclic voltammetry potentiostatic* en el software NOVA.
2. Introducir los siguientes parámetros:
Current Range: 1mA.

Apply: -0,49 V.

Start Potential: -0,49 V.

Upper Vertex: 1,6 V.

Lower Vertex: -0,5 V.

Stop Potential: -0,49 V.

Number of scans: 50.

Step: 0,01.

Record signals: a) Sampler: seleccionar WE(1). Current, WE(1). Potential, WE(1). Charge y Time.

b) Plots: seleccionar los gráficos i vs E , i vs t y Q vs t .

3. Limpiar los electrodos como se ha descrito en el apartado 5.4.

5.9. Cronopotenciometría

Se utiliza para ver la respuesta de potencial cuando se aplica una intensidad constante, en este caso a 1 mA, 2 mA, 5 mA y 10 mA. Cada una de estas intensidades ha de ser aplicada a films diferentes ya que este proceso puede dañar el film de polímero.

1. Seleccionar el procedimiento por defecto *Chrono potentiometry* ($\Delta t > 1 \text{ ms}$) en el software NOVA.
2. Introducir los siguientes parámetros:
Apply: 1 mA, 2 mA, 5 mA y 10 mA.
Record signals: a) Sampler: seleccionar WE(1). Current, WE(1). Potential y WE(1). Charge.
b) Plots: seleccionar los gráficos E vs t y Q vs t .
3. Limpiar los electrodos como se ha descrito en el apartado 5.4.

6. Resultados

En este apartado se presentarán e interpretarán todos los datos obtenidos. Primeramente se comentarán las cronoamperometrías y el tiempo de generación de cada capa del film.

A continuación se comentarán las ciclovoltamperometrías seguidas por los cálculos de LEA. Estos dos subapartados están estructurados de la siguiente forma: primero se presentan los datos de los blancos, seguidamente se hace una comparación entre estos y seguidamente se presentan las placas con interfase y se comparan entre ellas. Finalmente se hace una comparación entre todas las placas.

Seguidamente se expondrán los resultados de las cronopotenciometrías, separadas por intensidades y por tipos de placa, y finalmente, se comentará la morfología de los capacitadores, mostrando los resultados del AFM y del SEM.

6.1. Cronoamperometrías

Las cronoamperometrías se han usado para generar las diferentes capas del film. Las capas 1 y 4 están formadas únicamente por PEDOT, mientras que las capas 2 y 3 están formadas por el copolímero P(EDOT-NMePy).

Se ha fijado una carga de electrogeneración de 0,55 C en la cual, al llegar el proceso a este valor, el programa se detendrá y por lo tanto finalizará la generación. Este valor no es completamente real debido a que se produce una demora desde que el programa detecta este valor hasta que se produce el paro, resultando en valores de carga finales algo superiores al valor fijado.

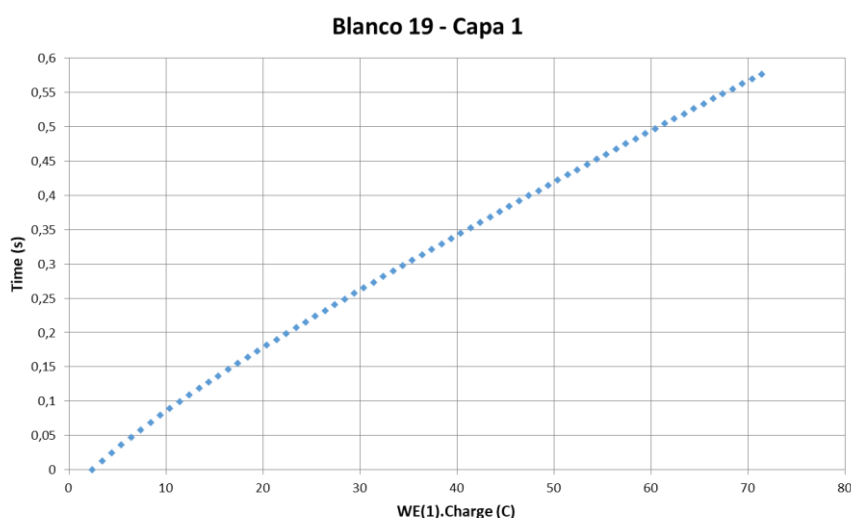


Figura 40. CA carga (C) vs tiempo (s) de la primera capa de la placa "Blanco 19".

El potencial de generación de 1,40 V se ha determinado a partir de la ciclovoltamperometría de oxidación/reducción del PEDOT y del NMePy, a este potencial la densidad de corriente es elevada, y es inferior al primer potencial de pico anódico (primer máximo) de ambos monómeros.

Se ha estudiado el tiempo que ha tardado cada una de las capas de las diferentes placas que se han generado durante el proyecto. Se ha calculado la media acotada excluyendo un porcentaje del 20% de los valores superiores e inferiores con la intención de eliminar valores extremos. Se ha obtenido los resultados siguientes:

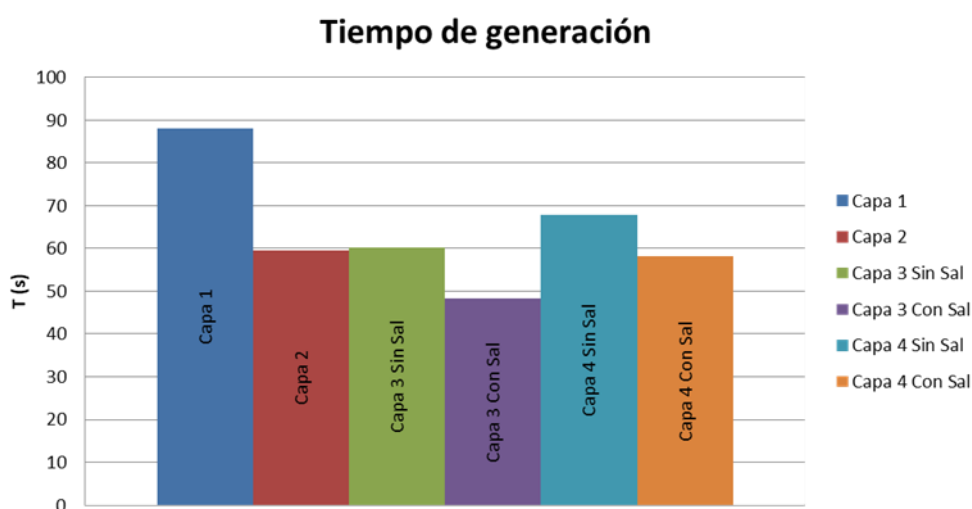


Figura 41. Tiempos de generación de las diferentes capas.

Tabla 15. Tiempos de generación de las diferentes capas.

Capa 1	Capa 2	Capa 3 Sin Sal	Capa 3 Con Sal	Capa 4 Sin Sal	Capa 4 Con Sal
88,14 s	59,59 s	60,27 s	48,33 s	67,75 s	58,06 s

El tiempo de generación media de una placa sin sal es de 275,75 s, mientras que para una placa con interfase es de 254,12 s. A estos valores hay que sumarle además el tiempo que se tarda en preparar el montaje eléctrico con cada cambio de celda, así como el tiempo necesario para limpiar el contraelectrodo y el electrodo de referencia, y en el caso de las placas con interfase, el tiempo de inmersión y de secado antes de volver a generar sobre la capa de sal.

Con la repetición de la experiencia, se ha determinado que los blancos tardan unos 10 min en fabricarse mientras que las placas con interfase tardan aproximadamente 1 h desde el inicio de su elaboración.

La primera capa generada es la más lenta de todas, esto es debido a que a este potencial se comprueba que los films obtenidos son uniformes y adherentes (Figura 42), lo cual facilita la

generación de otras capas sobre ellos, siendo necesario menor tiempo de generación en las capas sucesivas.

Las capas 2, 3 sin sal y 4 tienen un tiempo de generación muy similar entre ellas, de aproximadamente unos 60 s. La diferencia más destacable se encuentra en la capa 3 con sal, que es la más rápida de todas. Esto puede ser debido a que la placa no se haya secado correctamente después de la inmersión y que los iones disociados de la sal faciliten el paso de corriente, acelerando así el proceso.

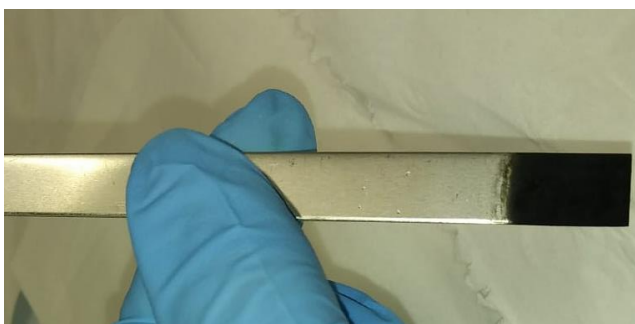


Figura 42. Placa de acero con una capa de polímero generado por CA.

6.2. Ciclovoltamperometrías (CV)

Las ciclovoltamperometrías se han utilizado para evaluar el comportamiento de los capacitadores a lo largo de ciclos sucesivos de carga y descarga. En el caso de polímeros conductores como el PEDOT y el PNMePy, el potencial aplicado tiene que iniciar en un valor negativo y finalizar en uno positivo debido a que el film se forma por oxidación sobre el electrodo.

Cada ciclovoltamperometría realizada ha constado de 50 ciclos de -0,5 V a 1,6 V.

6.2.1. Blancos en acetonitrilo

En este apartado se presentan los datos obtenidos de las repeticiones de los blancos conservados en acetonitrilo.

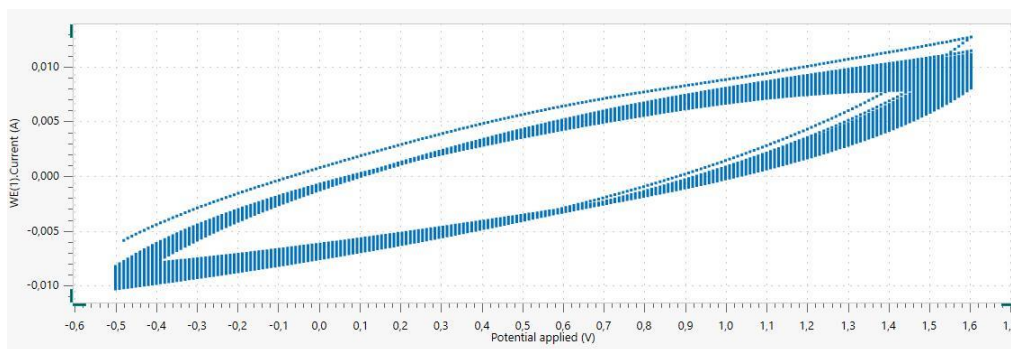


Figura 43. CV del blanco en acetonitrilo "BacN 1".

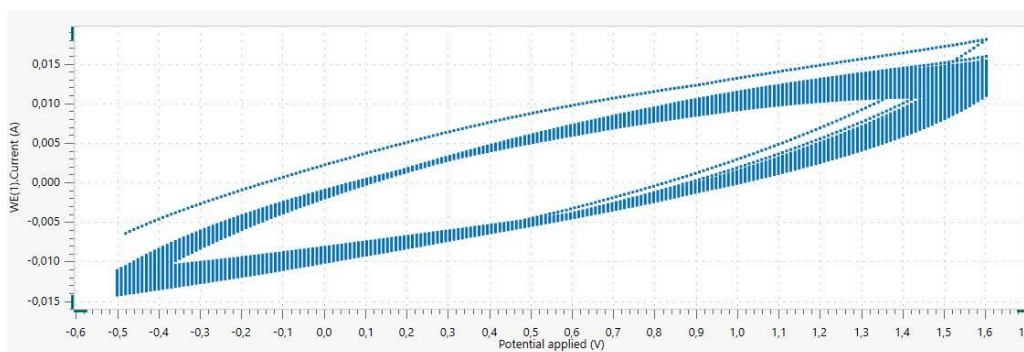


Figura 44. CV del blanco en acetonitrilo "BacN 2".

Debido a la gran cantidad de datos que devuelve la experiencia, a continuación se muestran el segundo y el último ciclo, ya que son los ciclos más representativos del proceso y facilitan la comprensión de los datos.

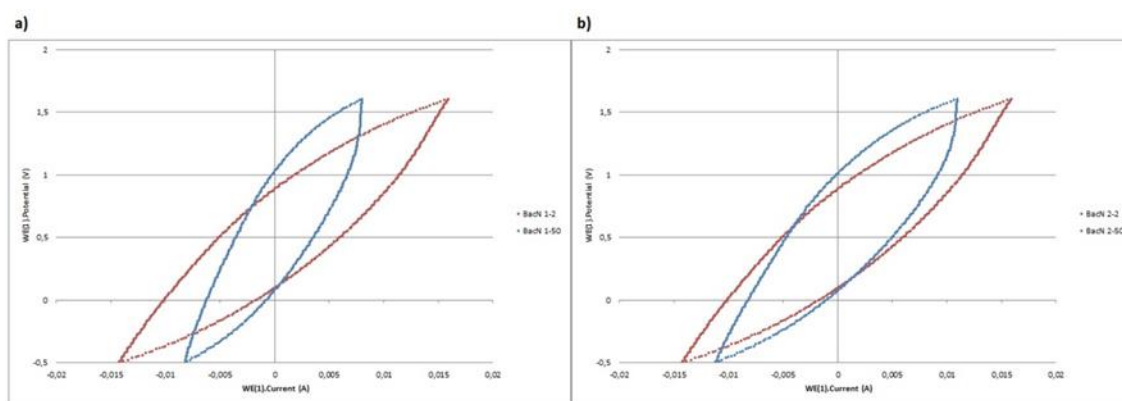


Figura 45. Ciclos 2 y 50 de a) "BacN 1" y b) "BacN 2".

Y a continuación se comparan los ciclos entre placas:

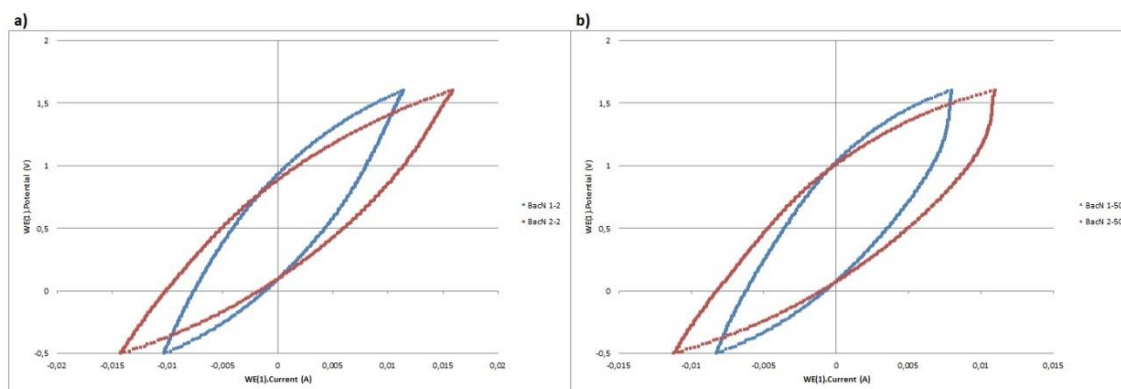


Figura 46. CV de las placas “BacN 1” y “BacN 2” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 16. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

Ciclo 2	BacN 1	BacN 2	Ciclo 50	BacN 1	BacN 2
I en 1,6 V	11,46 mA	15,93 mA	I en 1,6 V	8,04 mA	10,98 mA
I en -0,5 V	- 9,69 mA	- 13,42 mA	I en -0,5 V	- 7,80 mA	- 10,61 mA

Los resultados obtenidos son similares, con una diferencia máxima de 4,47 mA entre las dos placas en el ciclo 2 y de 3 mA en el ciclo 50. Los datos muestran que el valor absoluto de la intensidad ha disminuido en ambos potenciales a lo largo de los ciclos debido al desgaste de la placa. Los porcentajes de pérdida de intensidad se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 17. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

	BacN 1	BacN 2
En 1,6 V	29,84 %	31,07 %
En -0,5 V	19,05 %	20,93 %

Como se puede observar, la repetición “BacN 2” ha experimentado un desgaste ligeramente superior a la repetición “BacN 1”.

6.2.2. Blancos en agua

Los resultados de las ciclovoltamperometrías elaboradas en los blancos almacenados en agua son los siguientes.

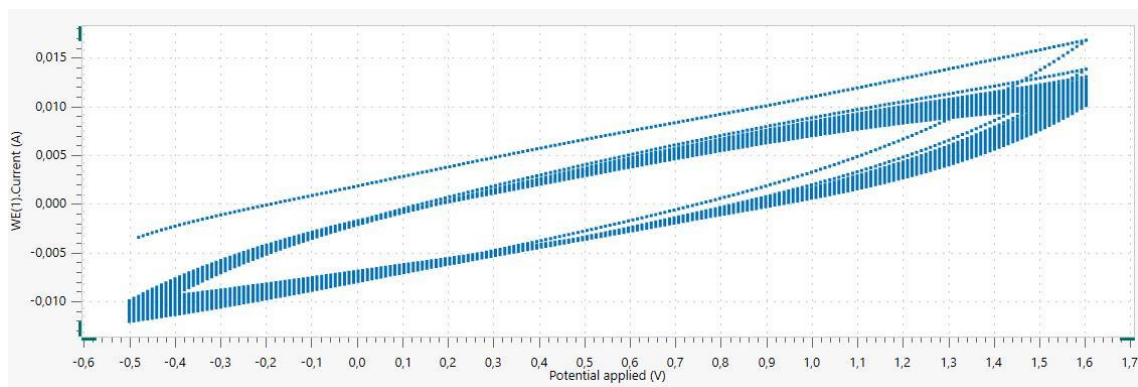


Figura 47. CV del blanco en acetonitrilo "BH₂O 1".

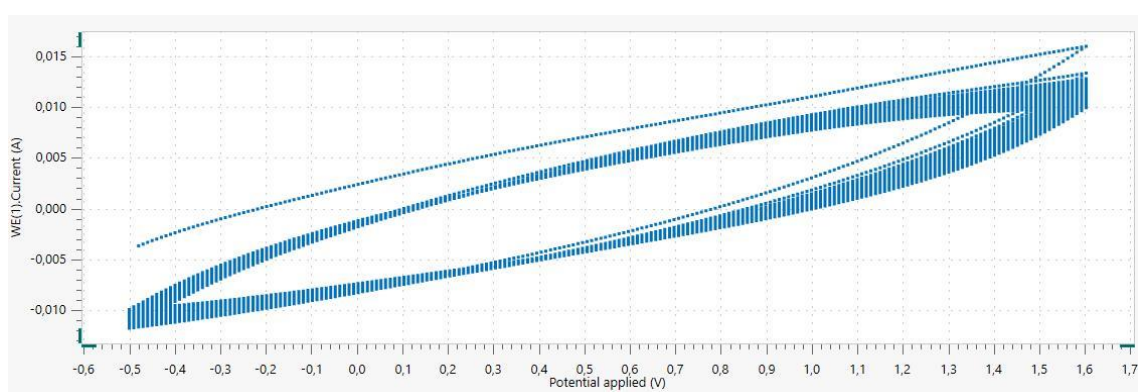


Figura 48. CV del blanco en acetonitrilo "BH₂O 2".

Los ciclos 2 y 50 de cada placa son los siguientes:

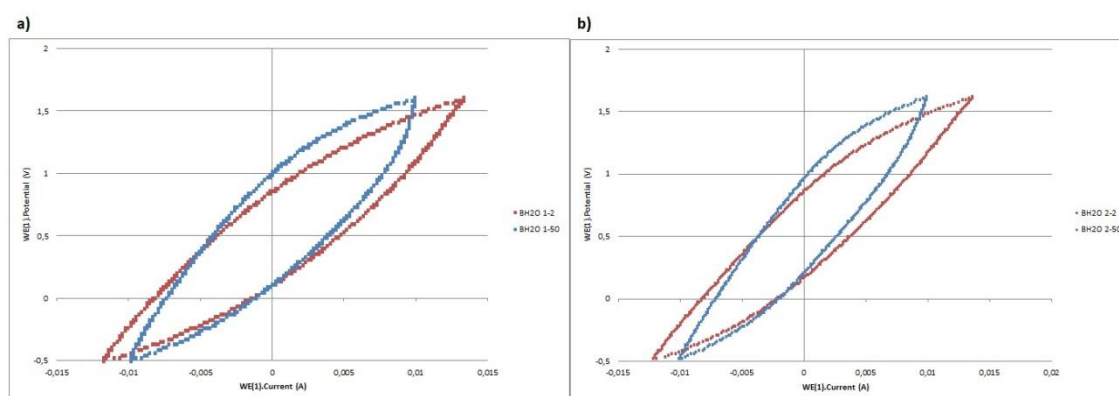


Figura 49. Ciclos 2 y 50 de a) "BH₂O 1" y b) "BH₂O 2".

Y a continuación se comparan ambos ciclos entre las placas.

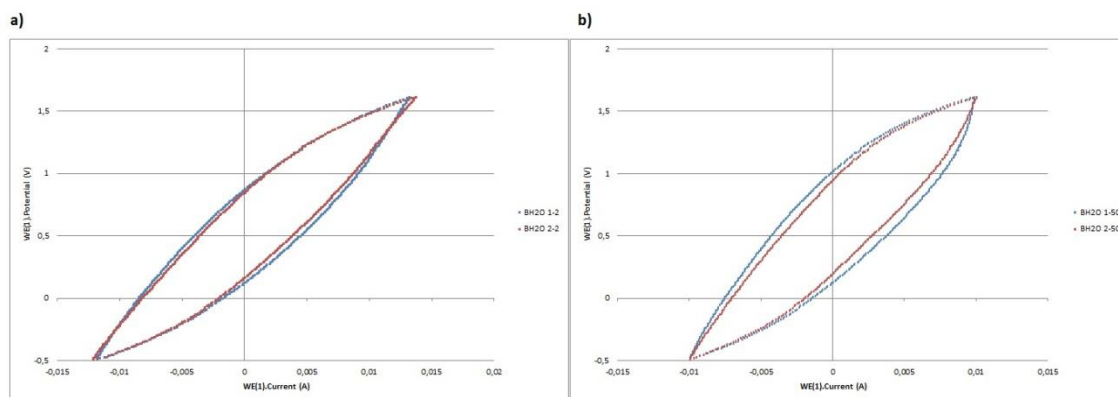


Figura 50. CV de las placas “BH₂O 1” y “BH₂O 2” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 18. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “BH₂O 1” y “BH₂O 2”.

Ciclo 2	BH ₂ O 1	BH ₂ O 2	Ciclo 50	BH ₂ O 1	BH ₂ O 2
I en 1,6 V	13,83 mA	13,35 mA	I en 1,6 V	10,09 mA	9,94 mA
I en -0,5 V	- 11,10 mA	- 10,98 mA	I en -0,5 V	- 9,46 mA	- 9,44 mA

Los resultados obtenidos en los blancos almacenados en agua son casi idénticos en ambas repeticiones, en el ciclo 2 hay una diferencia máxima de 0,48 mA mientras que en el ciclo 50 esta diferencia disminuye a 0,15 mA. Los porcentajes de pérdida de intensidad obtenidos se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “BH₂O 1” y “BH₂O 2”.

	BH ₂ O 1	BH ₂ O 2
En 1,6 V	27,04 %	25,54 %
En -0,5 V	14,77 %	14,03 %

La pérdida de intensidad es similar en ambas repeticiones, a los 1,6 V la placa “BH₂O 2” experimenta una pérdida un 1,50 % inferior que la placa “BH₂O 1”, mientras que a los -0,5 V la pérdida es un 0,74 % inferior.

6.2.3. Comparación de blancos

En este subapartado se comparan los resultados de los dos tipos de blancos para poder decidir si es favorable conservar las placas en agua o en acetonitrilo. Se han escogido el resultado más representativo de cada tipo de placa para la comparación. La Figura 51 y la Tabla 20 comparan los ciclos 2 y 50 de los dos tipos de placas.

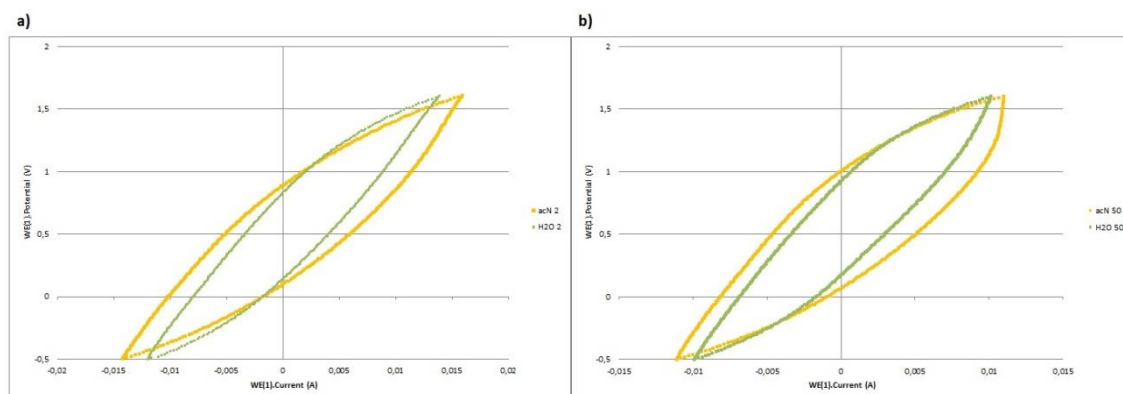


Figura 51. CV de las placas “BacN” y “BH₂O” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 20. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “BacN” y “BH₂O”.

Ciclo 2	BacN	BH ₂ O
I en 1,6 V	15,93 mA	13,83 mA
I en -0,5 V	- 13,42 mA	- 11,10 mA

Ciclo 50	BacN	BH ₂ O
I en 1,6 V	10,98 mA	10,09 mA
I en -0,5 V	- 10,61 mA	- 9,46 mA

Los resultados indican que la intensidad de los blancos en acetonitrilo es superior a la de los blancos en agua en ambos ciclos, aproximadamente de unos 2mA en el primer ciclo y de 1 mA en el último ciclo.

Tabla 21. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “BacN” y “BH₂O”.

	BacN	BH ₂ O
En 1,6 V	31,07 %	27,04 %
En -0,5 V	20,94 %	14,77 %

El cálculo de pérdida de intensidad indica que las placas en agua han sufrido una menor pérdida de intensidad. Pese a este resultado, teniendo en cuenta que la intensidad final es superior en los conservados en acetonitrilo, no es posible tomar una decisión concluyente, por lo que el cálculo de LEA será decisivo para facilitar la elección.

6.2.4. Placas con interfase salina

La diferencia de estas placas con los blancos es la inclusión de una pequeña capa de NaCl entre las dos capas de copolímero. Esto, además de la inclusión de cristales de sal, también repercute en la estructura del capacitador, como se observa en el apartado 6.5. Los resultados son los siguientes.

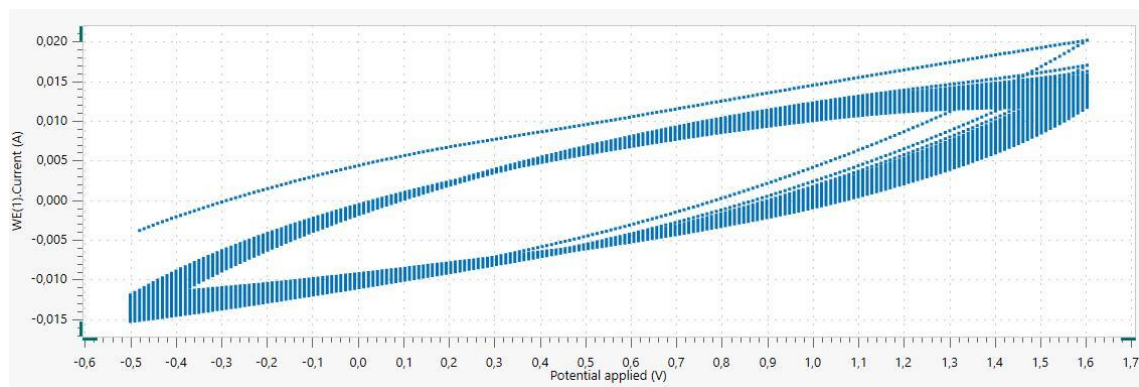


Figura 52. CV de la placa “Con sal 1”.

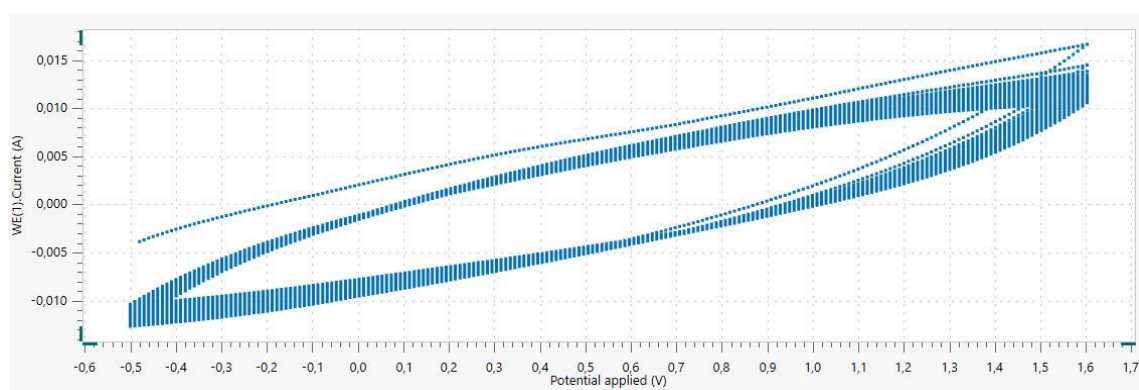


Figura 53. CV de la placa “Con sal 2”.

La Figura 54 muestra los ciclos 2 y 50 de las repeticiones.

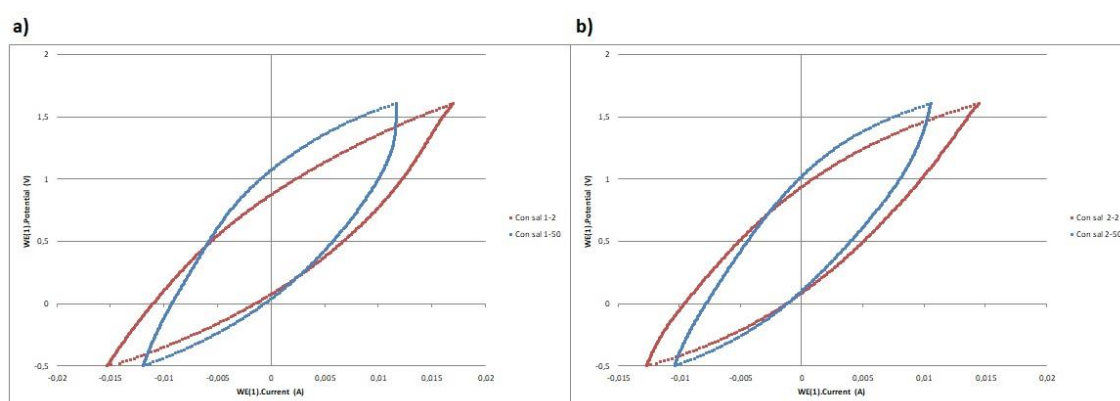


Figura 54. Ciclos 2 y 50 de a) “Con sal 1” y b) “Con sal 2”.

La Figura 55 y la Tabla 22 muestran la comparación de las placas en cada ciclo.

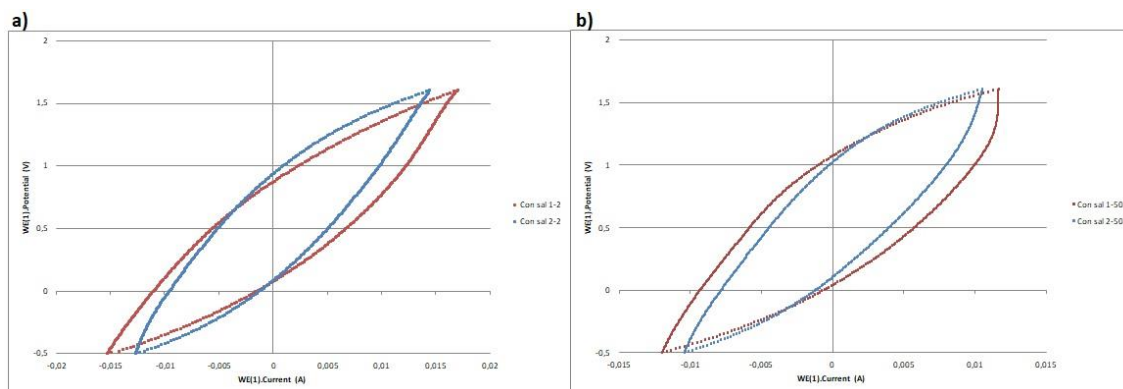


Figura 55. CV de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 22. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.

Ciclo 2	Con sal 1	Con sal 2
I en 1,6 V	17,03 mA	14,47 mA
I en -0,5 V	- 14,17 mA	- 11,86 mA

Ciclo 50	Con sal 1	Con sal 2
I en 1,6 V	11,70 mA	10,56 mA
I en -0,5 V	- 11,33 mA	- 9,83 mA

En el ciclo 2 la diferencia entre intensidades es superior a la del ciclo 50. En el primer ciclo la diferencia máxima es de 2,56 mA mientras que en el último ciclo es de 1,50 mA. La pérdida de intensidad a lo largo de los ciclos se muestra en la Tabla 23.

Tabla 23. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.

	Con sal 1	Con sal 2
En 1,6 V	31,30 %	27,02 %
En -0,5 V	20,04 %	17,12 %

En este caso, en ambos potenciales la segunda placa ha sufrido una pérdida de intensidad un 3 % inferior a la primera.

6.2.5. Placas con interfase nanoporosa

Estas placas son iguales que aquellas con interfase salina, la diferencia reside en que han pasado un día entero sumergidas en agua destilada para disolver el NaCl añadido. Los huecos formados en este proceso se pueden observar en el apartado 6.5.

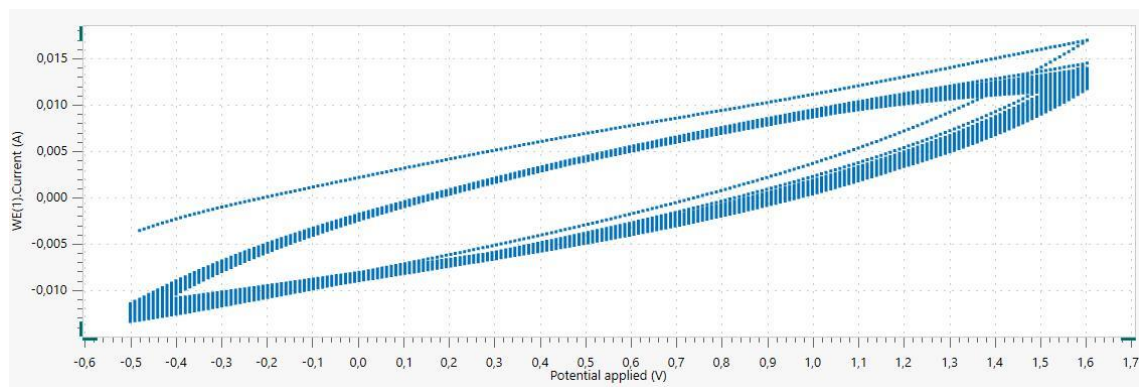


Figura 56. CV de la placa "Sal disuelta 1".

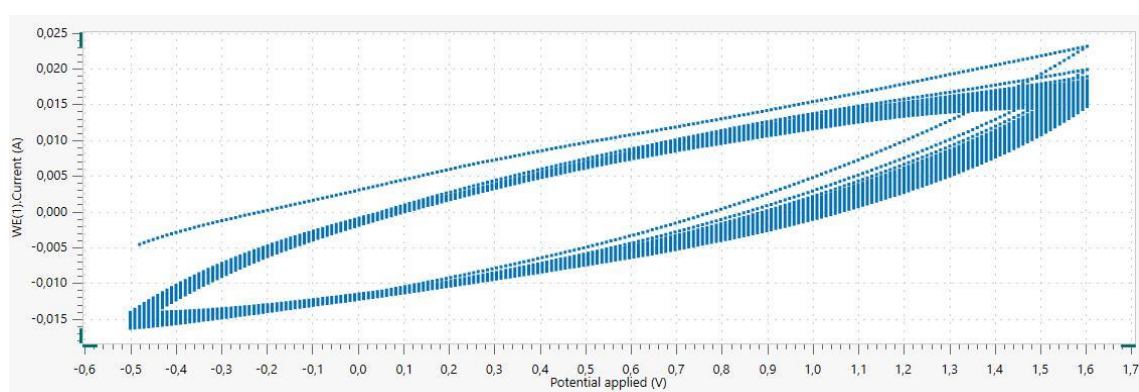


Figura 57. CV de la placa "Sal disuelta 2".

La siguiente figura muestra los ciclos 2 y 50 de las placas.

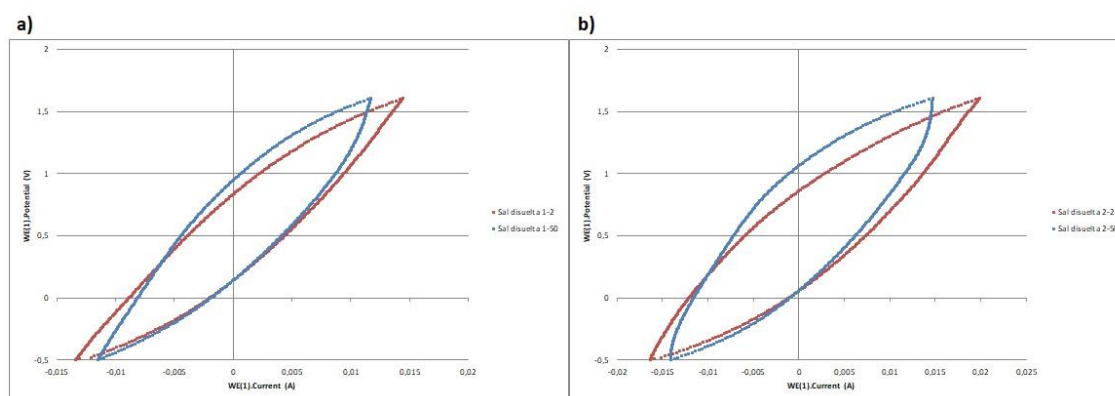


Figura 58. Ciclos 2 y 50 de a) "Sal disuelta 1" y b) "Sal disuelta 2".

La Figura 59 muestra ambas placas en cada ciclo.

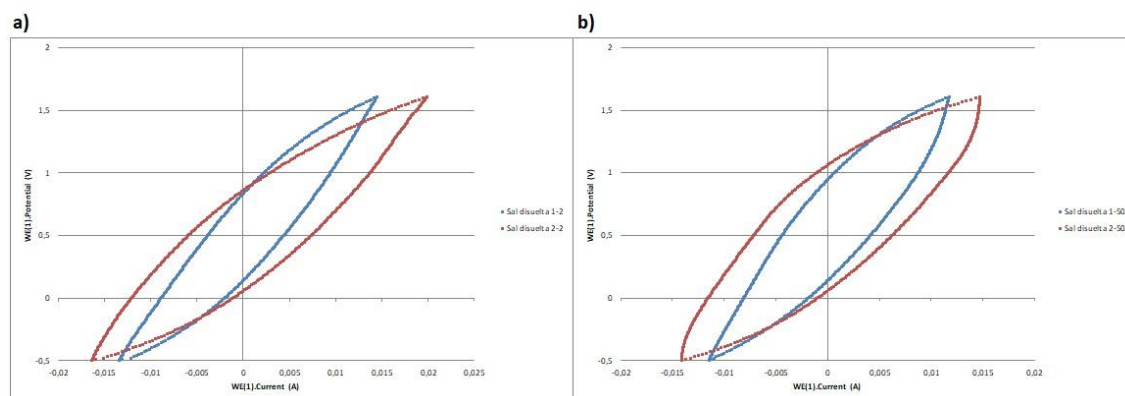


Figura 59. CV de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 24. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

Ciclo 2	Sal disuelta 1	Sal disuelta 2	Ciclo 50	Sal disuelta 1	Sal disuelta 2
I en 1,6 V	14,47 mA	19,86 mA	I en 1,6 V	11,73 mA	14,71 mA
I en -0,5 V	- 12,09 mA	- 15,13 mA	I en -0,5 V	- 11,00 mA	- 13,28 mA

Durante el primer ciclo del proceso hay una diferencia máxima de 5 mA a los 1,6 V. Durante el último ciclo esta diferencia disminuye a 3 mA. La Tabla 25 muestra la pérdida de intensidad al final del proceso.

Tabla 25. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

	Sal disuelta 1	Sal disuelta 2
En 1,6 V	18,94 %	25,93 %
En -0,5 V	9,02 %	12,23 %

Con los datos de la placa “Sal disuelta 2” muestran un desgaste superior al de la placa “Sal disuelta 1”. A los 1,6 V la diferencia es de un 7 % mientras que a los -0,5 V la diferencia es tan solo de un 3%.

6.2.6. Comparación entre interfases

En este subapartado se comparan los dos tipos de placas con interfase para determinar si el hecho de diluir la sal influye en las propiedades eléctricas del capacitador.

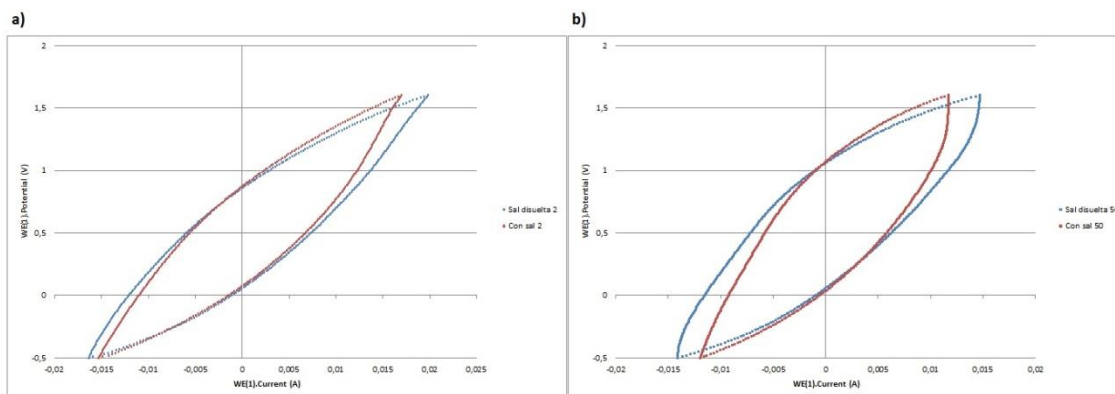


Figura 60. CV de las placas “Con sal” y “Sal disuelta” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 26. Datos de los ciclos 2 y 50 de las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

Ciclo 2	Con sal	Sal disuelta	Ciclo 50	Con sal	Sal disuelta
I en 1,6 V	17,03 mA	19,86 mA	I en 1,6 V	11,70 mA	14,71 mA
I en -0,5 V	- 14,17 mA	- 15,13 mA	I en -0,5 V	- 11,33 mA	- 13,28 mA

Las placas con interfase nanoporosa han experimentado unas intensidades superiores en ambos ciclos, de aproximadamente 3 mA a los 1,6 V en los dos ciclos y de 1 mA a los -0,5 V del primer ciclo y 2 mA en el último ciclo a ese mismo voltaje.

Tabla 27. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

	Con sal	Sal disuelta
En 1,6 V	31,30 %	25,93 %
En -0,5 V	20,04 %	12,23 %

En el caso de las placas con interfase, la pérdida de intensidad ha sido menor en el caso de las placas con interfase nanoporosa, lo que parece indicar, junto al hecho de que las intensidades son mayores, que estas placas suponen una mejora respecto de las placas con interfase salina. Una vez más, el cálculo de LEA será de gran ayuda para poder tomar una decisión.

6.2.7. Comparación entre todas las placas

Finalmente se comparan todos los tipos de placas para comparar los resultados.

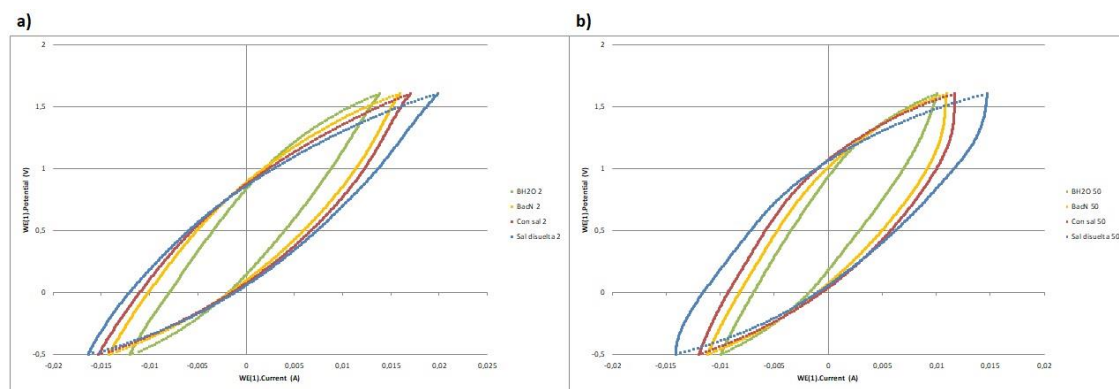


Figura 61. CV de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta” para los ciclos a) segundo y b) último.

Tabla 28. Datos del ciclo 2 de las CVs de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Ciclo 2				
	BacN	BH ₂ O	Con sal	Sal disuelta
I en 1,6 V	15,93 mA	13,83 mA	17,03 mA	19,86 mA
I en -0,5 V	- 13,42 mA	- 11,10 mA	- 14,17 mA	- 15,13 mA

Tabla 29. Datos del ciclo 50 de las CVs de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Ciclo 50				
	BacN	BH ₂ O	Con sal	Sal disuelta
I en 1,6 V	10,98 mA	10,09 mA	11,70 mA	14,71 mA
I en -0,5 V	- 10,61 mA	- 9,46 mA	- 11,33 mA	- 13,28 mA

Ambas placas con interfase experimentan una intensidad mayor a los blancos en cada uno de los ciclos. Esto parece indicar que la inclusión de una interfase ha significado en una mejoría de las propiedades eléctricas. Esto es debido a que la interfase provoca un aumento en la superficie específica del capacitador, aumentando así la capacitancia del sistema acorde con la ecuación Ec. 3.16.

A continuación se compara el desgaste de las placas.

Tabla 30. Porcentajes de pérdida de intensidad de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

	BacN	BH ₂ O	Con sal	Sal disuelta
En 1,6 V	31,07 %	27,04 %	31,30 %	25,93 %
En -0,5 V	20,94 %	14,77 %	20,04 %	12,23 %

Respecto a la pérdida de intensidad, la inclusión de una interfase no siempre es positiva. En el caso de las placas con interfase salina la pérdida de intensidad es mayor al resto de placas, esto puede ser debido a que los cristales de sal adheridos a la placa debiliten su estructura y por lo tanto sufran un mayor desgaste.

Por otro lado, las placas con interfase nanoporosa presentan la menor pérdida de intensidad, lo que junto al hecho de que también son las placas con una intensidad mayor, parece indicar que la inclusión de nanoporos mejora las propiedades eléctricas del capacitor.

6.3. Pérdida de electroestabilidad (LEA)

A partir de las ciclovoltamperometrías efectuadas se ha calculado el porcentaje de pérdida de electroestabilidad o LEA (del inglés “loss of electroestability”) para cada una de las placas mediante la ecuación Ec. 6.1. Esta ecuación nos permite cuantificar la estabilidad de las placas a lo largo de ciclos sucesivos de carga y descarga, donde Q_x es la carga eléctrica acumulada en coulombios (C) para un ciclo determinado x y Q_2 es la carga del ciclo inicial.

$$LEA (\%) = \frac{Q_2 - Q_x}{Q_2} \cdot 100 \quad (\text{Ec. 6.1})$$

Este valor se ha calculado de dos maneras distintas:

1. Respecto a la carga inicial.
2. Respecto a la carga anterior.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para los diferentes tipos de placas.

6.3.1. Blancos en acetonitrilo

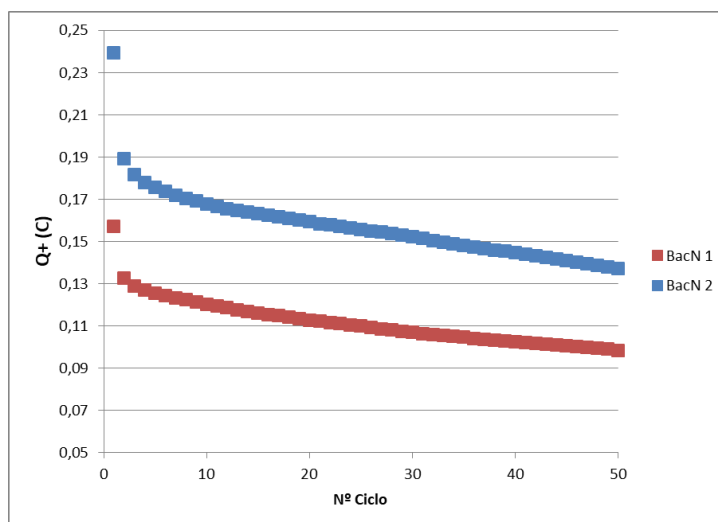


Figura 62. Carga acumulada en las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

Este gráfico muestra los valores máximos de carga eléctrica obtenidos en cada ciclo. Durante los primeros ciclos el valor de la carga baja considerablemente, pero rápidamente esta tendencia

decrece, y la carga pese a seguir disminuyendo su valor, lo hace a un ritmo inferior. La Tabla 31 muestra los valores de la carga en diferentes ciclos del proceso.

Tabla 31. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
BacN 1	132,52 mC	120,23 mC	109,82 mC	102,39 mC	98,48 mC
BacN 2	189,33 mC	167,78 mC	155,57 mC	144,52 mC	137,02 mC

Como era de esperar, la repetición que mostró una mayor intensidad es la que muestra una carga eléctrica mayor en cada ciclo. La diferencia entre los valores de las cargas son menores con el paso de los ciclos, empieza en un valor cercano a los 60 mA y termina en un valor aproximado de 40 mA, por lo que es de esperar que el LEA de “BacN 2” sea el mayor de los dos.

La Figura 63 y la Tabla 32 muestran los resultados del cálculo de LEA respecto del ciclo inicial de estas placas.

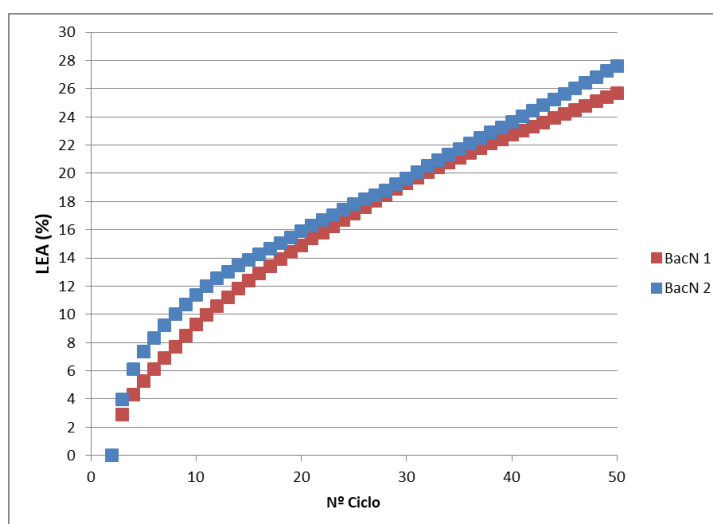


Figura 63. LEAs de las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

Tabla 32. LEA de los ciclos más representativos de las placas “BacN 1” y “BacN 2”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
BacN 1	9,27 %	17,13 %	22,74 %	25,69 %
BacN 2	11,38 %	17,83 %	23,66 %	27,63 %

Los valores de LEA obtenidos para las placas son muy similares, con apenas una diferencia máxima entre ciclos de un 2,11 %. Se puede observar que durante los primeros ciclos la placa pierde electroestabilidad más rápidamente y seguidamente pierde electroestabilidad a un ritmo constante de manera muy inferior. Este hecho se visualiza mejor en la siguiente figura, donde el LEA se ha calculado respecto al ciclo anterior.

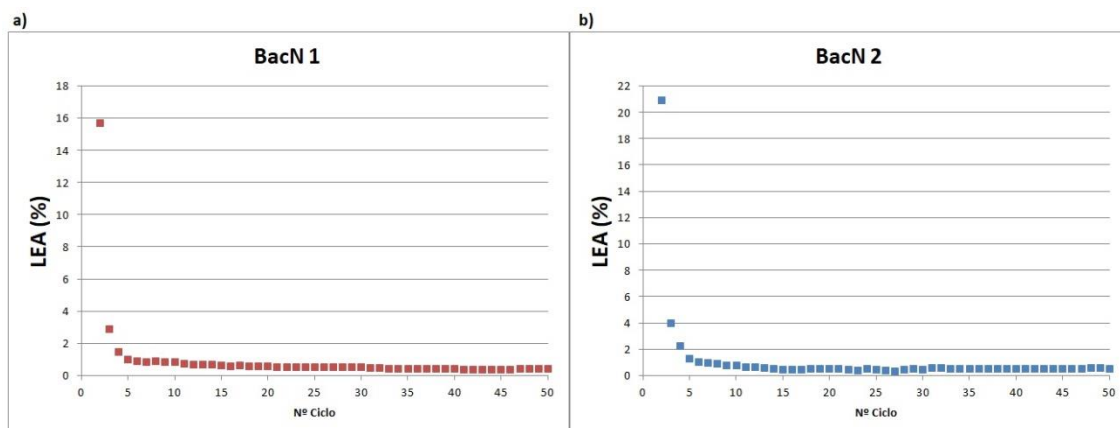


Figura 64. LEA ciclo a ciclo de las placas a) "BacN 1" y b) "BacN 2".

6.3.2. Blancos conservados en agua

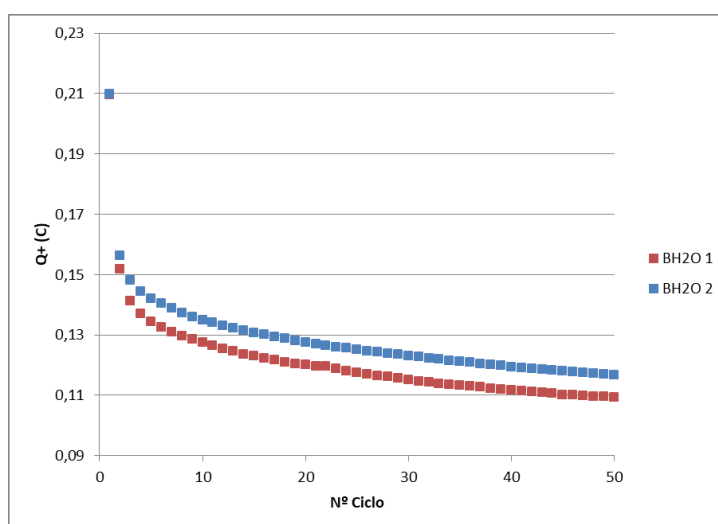


Figura 65. Carga acumulada en las placas "BH₂O 1" y "BH₂O 2".

Tabla 33. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas "BH₂O 1" y "BH₂O 2".

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
BH2O 1	151,80 mC	127,41 mC	117,36 mC	111,63 mC	109,42 mC
BH2O 2	156,23 mC	134,96 mC	125,13 mC	119,456 mC	116,60 mC

Los resultados obtenidos son prácticamente idénticos, siendo la diferencia inferior a los 8 mC a lo largo del proceso. La Figura 66 muestra los resultados de LEA para estas muestras.

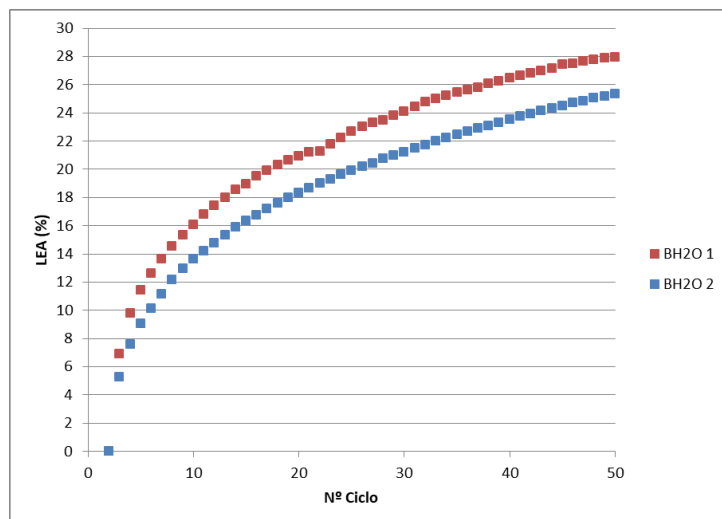


Figura 66. LEAs de las placas “BH₂O 1” y “BH₂O 2”.

Tabla 34. LEA de los ciclos más representativos de las placas “BH₂O 1” y “BH₂O 2”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
BH2O 1	16,07 %	22,69 %	26,46 %	27,92 %
BH2O 2	13,62 %	19,91 %	23,54 %	25,37 %

La repetición “BH₂O 1” ha experimentado un desgaste ligeramente superior a “BH₂O 2”, pese a eso, los resultados son muy parecidos, con una diferencia inferior al 3 % en cada ciclo. A continuación se presenta la pérdida de electroestabilidad ciclo a ciclo.

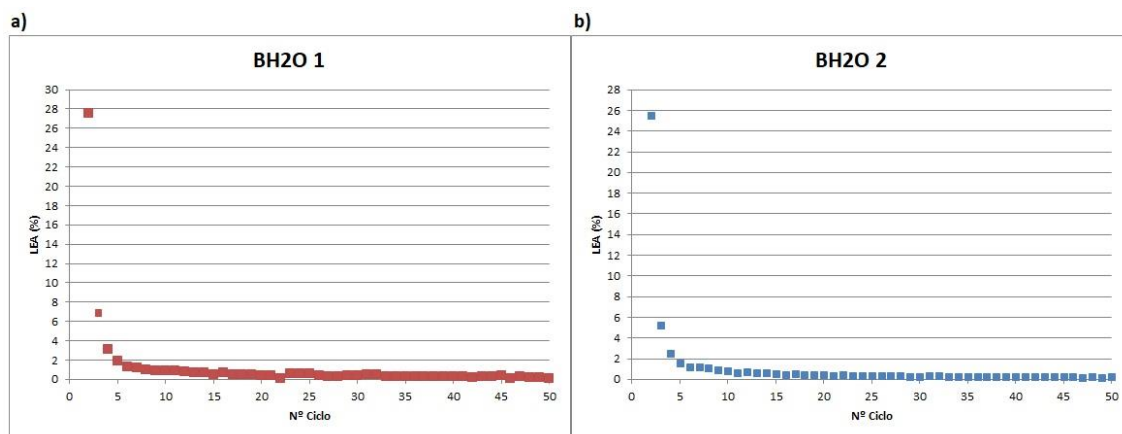


Figura 67. LEA ciclo a ciclo de las placas a) “BH₂O 1” y b) “BH₂O 2”.

6.3.3. Comparación de blancos

La Figura 68 muestra la comparación de la carga acumulada a lo largo de los ciclos de las muestras más representativas de blancos en acetonitrilo y en agua.

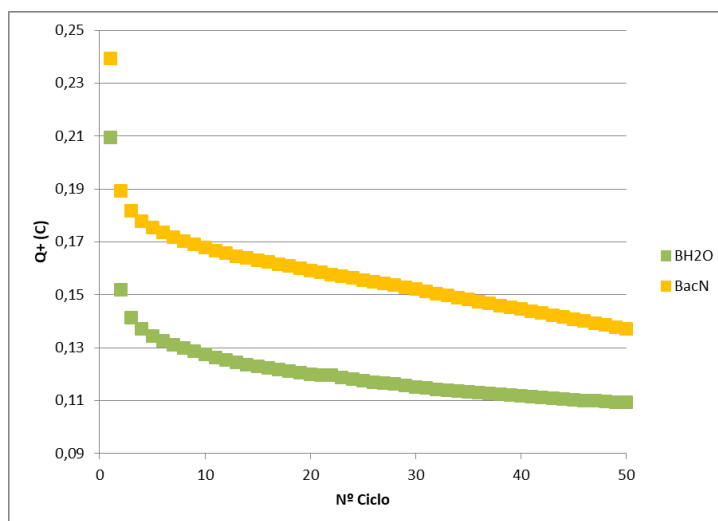


Figura 68. Carga acumulada en las placas “BacN” y “BH₂O”.

Tabla 35. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “BacN” y “BH₂O”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
BacN	189,33 mC	167,78 mC	155,57 mC	144,52 mC	137,02 mC
BH2O	151,80 mC	127,41 mC	117,36 mC	111,63 mC	109,42 mC

Los resultados muestran claramente que los blancos en acetonitrilo conservan una carga superior a la de los blancos en agua. La diferencia de carga es mayor en los ciclos iniciales (40,37 en el ciclo 10) y a lo largo del proceso esta diferencia se hace ligeramente inferior (27,60 mC en el ciclo final).

La Figura 69 y la Tabla 36 muestran el LEA de ambos tipos de placas.

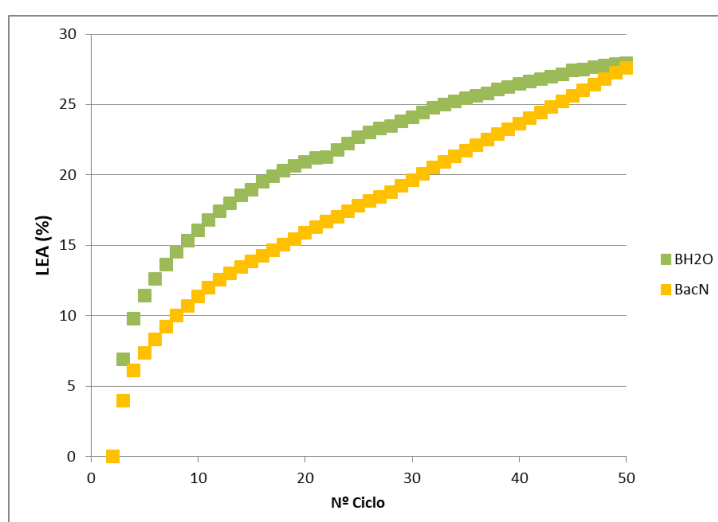


Figura 69. LEAs de las placas “BacN” y “BH₂O”.

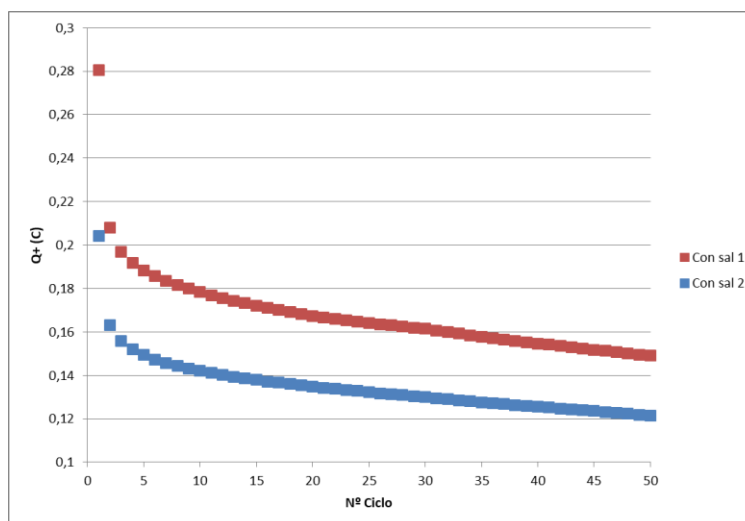
Tabla 36. LEA de los ciclos más representativos de las placas “BacN” y “BH₂O”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
BacN	11,38 %	17,83 %	23,66 %	27,63 %
BH₂O	16,07 %	22,69 %	26,46 %	27,92 %

Pese a que las placas conservadas en agua sufren un desgaste superior en los ciclos iniciales de la ciclovoltamperometría, al finalizar el proceso el desgaste en ambos tipos de placas es prácticamente el mismo.

Teniendo en cuenta la carga acumulada y el LEA final al cabo de 50 ciclos, conservar las placas en acetonitrilo parece favorable ya que la carga acumulada ciclo a ciclo es mayor sufriendo prácticamente la misma pérdida de carga que los blancos en agua.

6.3.4. Placas con interfase salina

**Figura 70.** Carga acumulada en las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.**Tabla 37.** Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
Con sal 1	208,11 mC	178,31 mC	164,08 mC	154,66 mC	148,97 mC
Con sal 2	163,18 mC	142,06 mC	132,30 mC	125,51 mC	121,44 mC

La carga acumulada de la repetición “Con sal 1” es superior a la de la muestra “Con sal 2”, de 44,92 mC en el ciclo inicial y de 27,53 mC en el ciclo final. La Figura 71 muestra que el LEA es muy similar entre ambas placas.

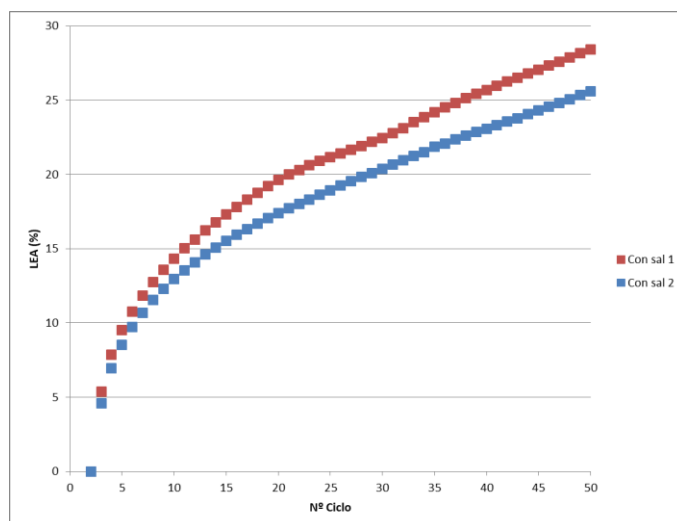


Figura 71. LEAs de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.

Tabla 38. LEA de los ciclos más representativos de las placas “Con sal 1” y “Con sal 2”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
Con sal 1	14,32 %	21,16 %	25,68 %	28,42 %
Con sal 2	12,94 %	18,93 %	23,08 %	25,58 %

En este caso, la diferencia entre las dos muestras aumenta con el paso de los ciclos, sin embargo esta diferencia siempre es inferior al 3%. La siguiente figura muestra el LEA ciclo a ciclo.

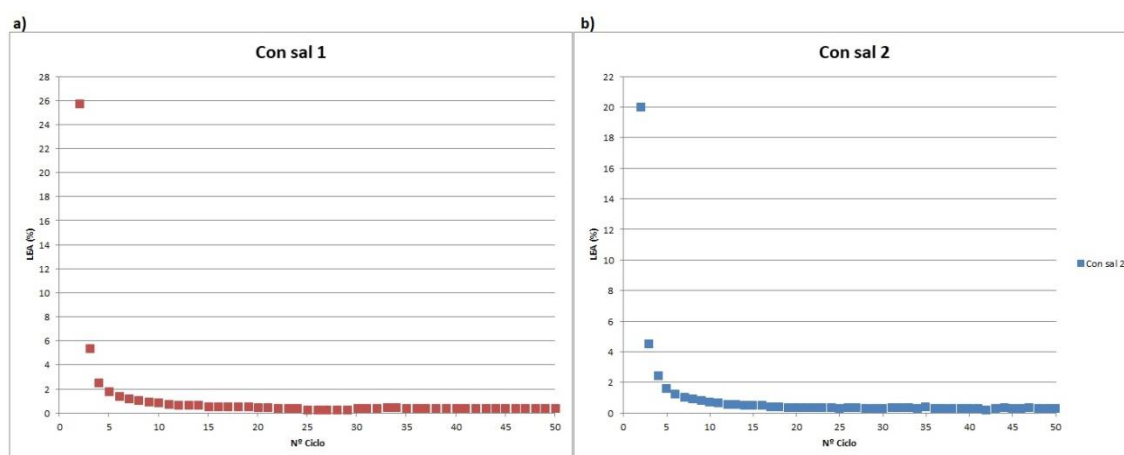


Figura 72. LEA ciclo a ciclo de las placas a) “Con sal 1” y b) “Con sal 2”.

6.3.5. Placas con interfase nanoporosa

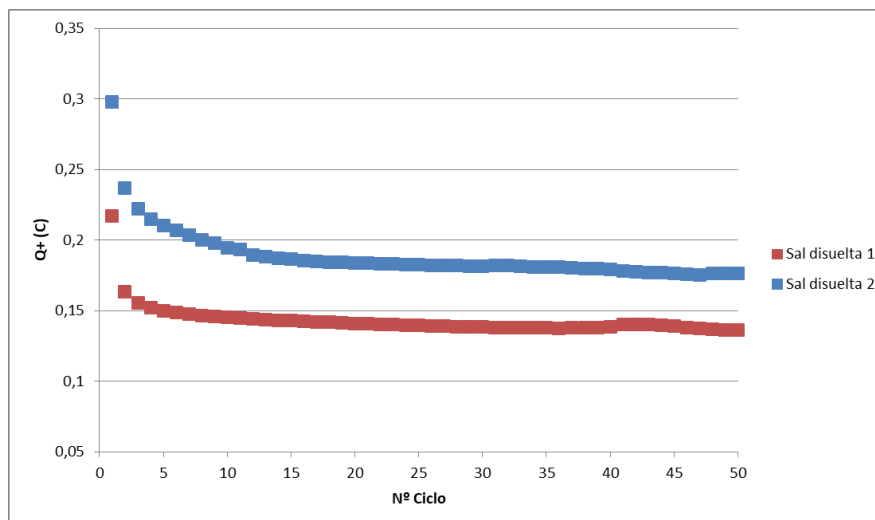


Figura 73. Carga acumulada en las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

Tabla 39. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
Sal disuelta 1	163,16 mC	145,09 mC	139,49 mC	138,78 mC	136,05 mC
Sal disuelta 2	236,84 mC	194,35 mC	182,43 mC	178,96 mC	176,34 mC

La segunda repetición tiene una carga acumulada superior a la placa “Sal disuelta 1”. Durante el primer ciclo la diferencia de este valor es mayor, de 73,68 mC, en el resto de ciclos la diferencia disminuye hasta que finalmente toma un valor de 40,29 mA.

La Figura 74 y la Tabla 40 muestran el LEA de ambas placas.

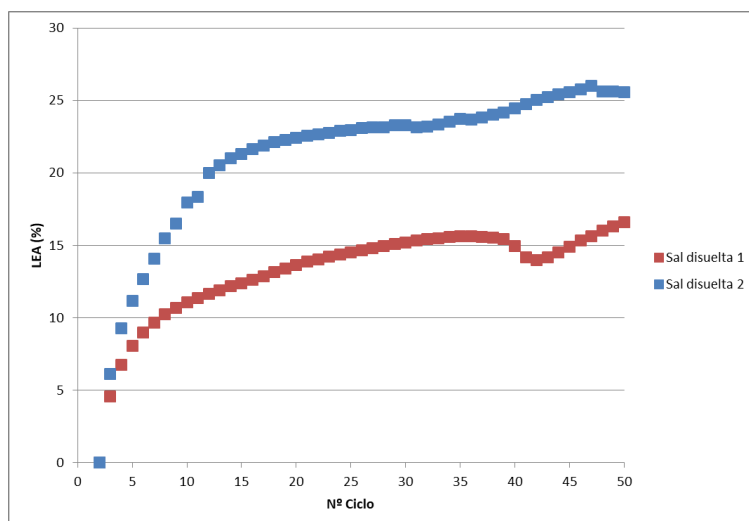


Figura 74. LEAs de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

Tabla 40. LEA de los ciclos más representativos de las placas “Sal disuelta 1” y “Sal disuelta 2”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
Sal disuelta 1	11,07 %	14,50 %	14,94 %	16,61 %
Sal disuelta 2	17,94 %	22,97 %	24,44 %	25,54 %

La repetición 1 tiene una pérdida considerablemente inferior. Esta placa, del ciclo 39 al 47 sufre un extraño aumento de carga acumulada que provoca una disminución del LEA en esa zona. Este hecho parece indicar que ha sucedido una anomalía en la prueba ya que no cumple con el comportamiento típico de un capacitador.

La siguiente figura muestra el LEA ciclo a ciclo.

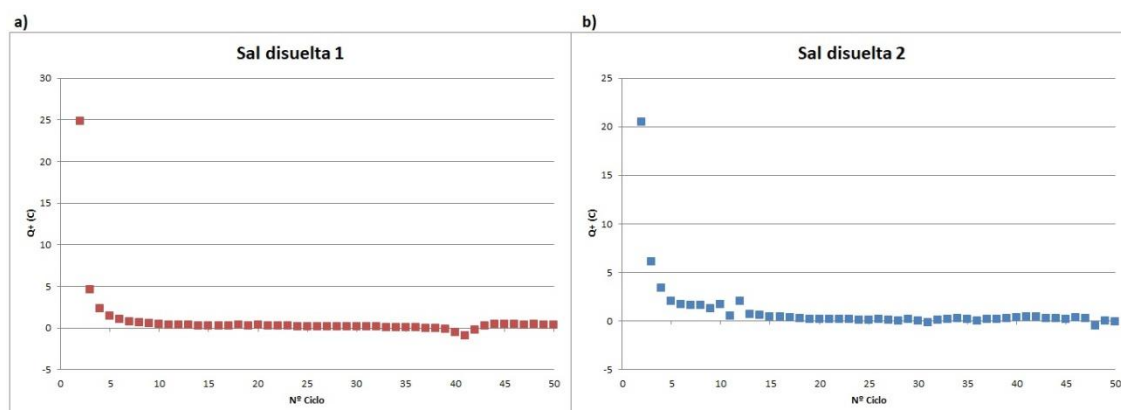


Figura 75. LEA ciclo a ciclo de las placas a) “Sal disuelta 1” y b) “Sal disuelta 2”.

6.3.6. Comparación de placas con interfase

En este subapartado se comparan los dos tipos de placas con interfase para determinar si el hecho de diluir la sal aporta alguna mejora a las propiedades eléctricas del capacitador.

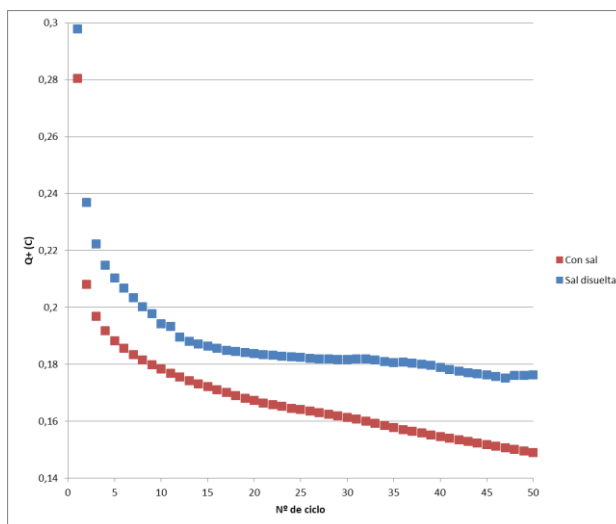


Figura 76. Carga acumulada en las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

Tabla 41. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
Con sal	208,11 mC	178,31 mC	164,08 mC	154,66 mC	148,97 mC
Sal disuelta	236,84 mC	194,35 mC	182,43 mC	178,96 mC	176,34 mC

Las placas con interfase nanoporosa acumulan una carga superior a las placas con interfase salina, con una diferencia de 27,36 mA en el último ciclo del proceso. En la Figura 77 compara el LEA de ambos tipos de placas.

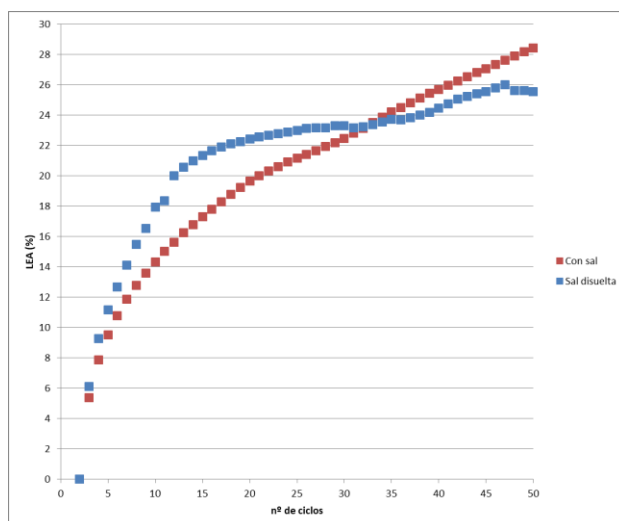


Figura 77. LEAs de las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

Tabla 42. LEA de los ciclos más representativos de las placas “Con sal” y “Sal disuelta”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
Con sal	14,32 %	21,16 %	25,68 %	28,42 %
Sal disuelta	17,94 %	22,97 %	24,44 %	25,54 %

Las placas con interfase nanoporosa tienen un LEA final ligeramente inferior al de las placas con interfase salina. A pesar de esto, durante los primeros ciclos las placas con la sal disuelta se desgastan con más rapidez que las placas con sal.

Estos dos factores confirman que disolver el NaCl constituye una mejora para el capacitador, ya que se obtiene una carga mayor además de un desgaste final inferior.

6.3.7. Comparación entre todas las placas

Finalmente, se muestra los resultados de todas las placas para comprobar que la adición de una interfase mejora las capacidades eléctricas del capacitador.

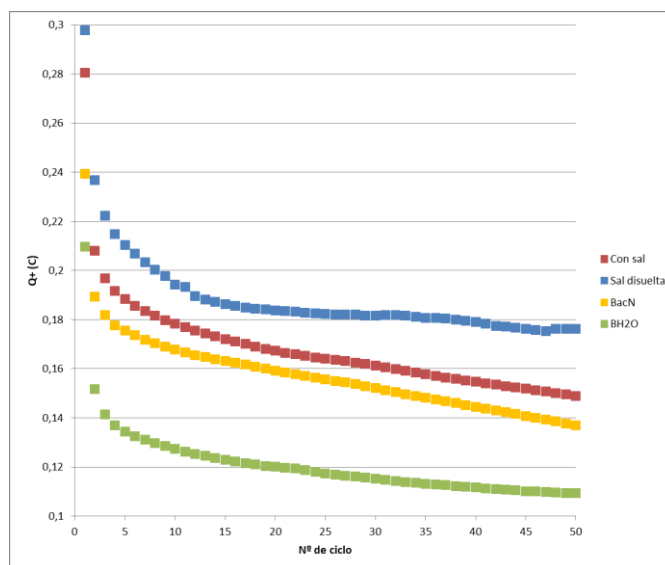


Figura 78. Carga acumulada en las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Tabla 43. Carga acumulada en los ciclos más representativos de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Placa	Q+ Ciclo 2	Q+ Ciclo 10	Q+ Ciclo 25	Q+ Ciclo 40	Q+ Ciclo 50
BacN	189,33 mC	167,78 mC	155,57 mC	144,52 mC	137,02 mC
BH2O	151,80 mC	127,41 mC	117,36 mC	111,63 mC	109,42 mC
Con sal	208,11 mC	178,31 mC	164,08 mC	154,66 mC	148,97 mC
Sal disuelta	236,84 mC	194,35 mC	182,43 mC	178,96 mC	176,34 mC

Ambas placas con interfase presentan una carga acumulada superior a los blancos. Como se ha comentado con anterioridad, esto es debido a que la interfase provoca cambios en la superficie específica del capacitador, el aumento de esta superficie (observable en el apartado 6.5) provoca un aumento directo en la capacitancia (Ec. 3.16), y por lo tanto, un aumento de la carga eléctrica acumulada (Ec. 3.15).

A continuación se compara la LEA de todos los diferentes tipos de placas.

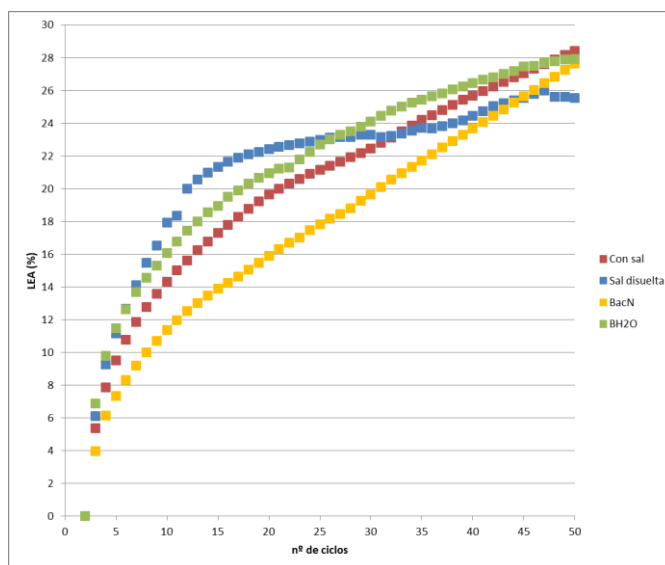


Figura 79. LEAs de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Tabla 44. LEA de los ciclos más representativos de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

Placa	LEA Ciclo 10	LEA Ciclo 25	LEA Ciclo 40	LEA Ciclo 50
BacN	11,38 %	17,83 %	23,66 %	27,63 %
BH2O	16,07 %	22,69 %	26,46 %	27,92 %
Con sal	14,32 %	21,16 %	25,68 %	28,42 %
Sal disuelta	17,94 %	22,97 %	24,44 %	25,54 %

Los cálculos de LEA obtenidos devuelven un valor similar en todos los tipos de placas, con apenas un 3 % de diferencia en el ciclo 50 entre la placa con mayor y menor desgaste. Aun así, se comprueba que las placas con interfase nanoporosa han experimentado la menor pérdida de electroestabilidad, y que las placas con interfase salina han experimentado la mayor pérdida de electroestabilidad, aunque este valor tan solo es de un 0,49 % superior a los blancos con acetonitrilo.

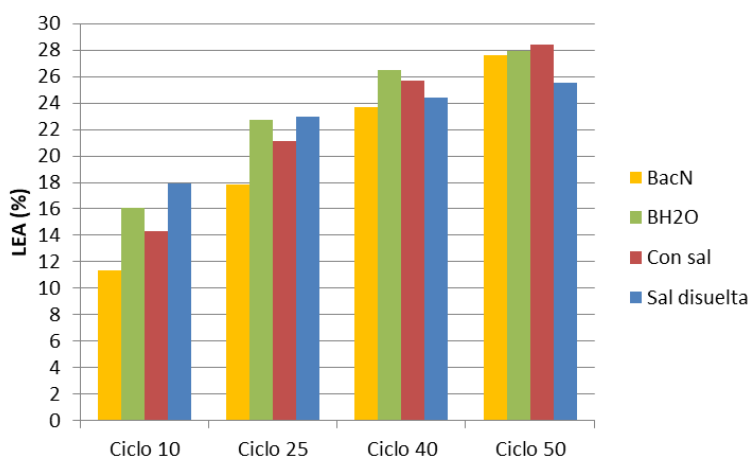


Figura 80. LEA de los ciclos más representativos de las placas “BacN”, “BH₂O”, “Con sal” y “Sal disuelta”.

A partir de los resultados obtenidos es posible afirmar que los capacitadores con interfase nanoporosa representan una mejora respecto a los sistemas multicapa de origen ya que se obtiene una carga mayor con un desgaste inferior.

6.4. Cronopotenciometrías (CP)

Las cronopotenciometrías (CPs) se utilizan para ver la respuesta de potencial del capacitor al ser sometidos a una intensidad de corriente determinada. En el caso de este estudio, se han efectuado pruebas a 1, 2, 5 y 10 mA.

Para una misma intensidad, es preferible obtener un potencial inferior ya que eso significa que las placas sufren un menor estrés eléctrico al encontrarse en las mismas condiciones. Si la intensidad a la que es sometida la muestra es elevada puede producirse la polarización del capacitor, un proceso en el cual la estructura interna del polímero se rompe, y por lo tanto, el capacitor deja de funcionar correctamente.

Las polarizaciones son fáciles de detectar, durante la CP aparece un pico máximo de potencial que rápidamente decrece. Un ejemplo claro se encuentra en la Figura 81, en la que la muestra a 10 mA ha sufrido una polarización durante los primeros 150 s de la experiencia.

6.4.1. Cronopotenciometrías de los blancos en acetonitrilo

Primeramente, se muestran los resultados de las CPs en las placas en acetonitrilo.

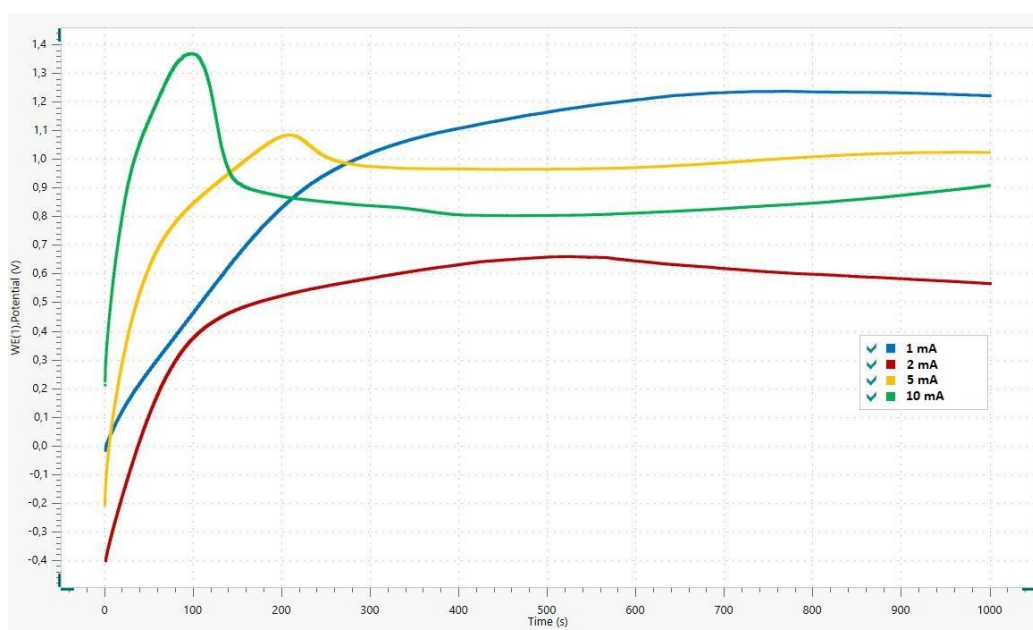


Figura 81. Resultados de las CPs a 1, 2, 5 y 10 mA de los blancos en acetonitrilo.

Los blancos en acetonitrilo tienen su valor mínimo en las pruebas a 2 mA y el más alto en las pruebas a 1 mA. Las pruebas a 5 y 10 mA han polarizado, haciéndolo esta última en un tiempo inferior y alcanzando un máximo de voltaje superior a la de 5 mA.

6.4.2. Cronopotenciometrías de los blancos en agua

Seguidamente se presentan los resultados de las CPs en las placas en agua.

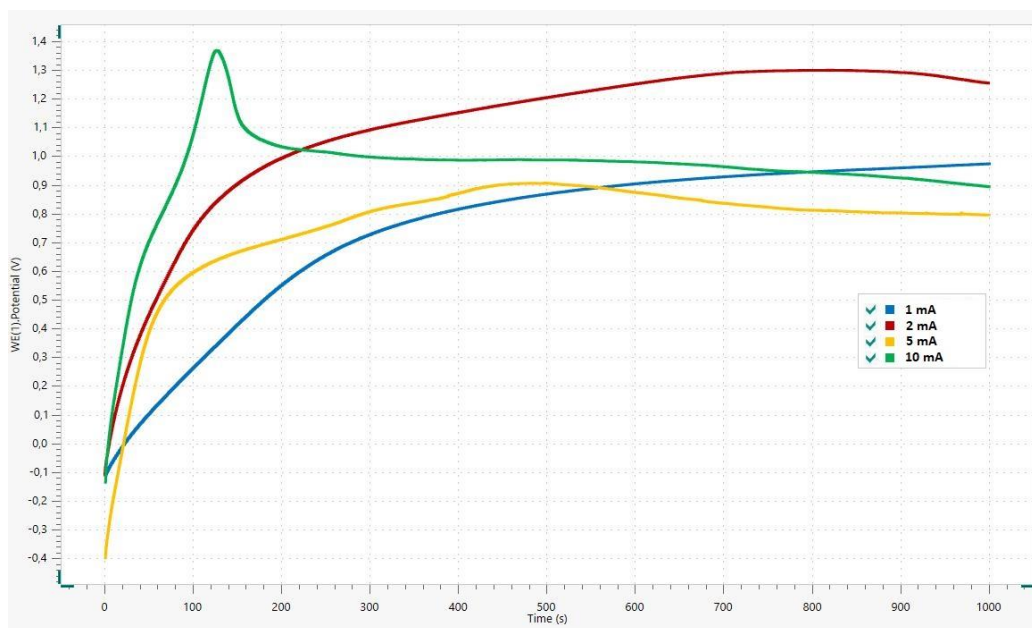


Figura 82. Resultados de las CPs a 1, 2, 5 y 10 mA de los blancos en agua.

En el caso de estas placas, las pruebas a las intensidades 1, 2 y 5 mA han resistido la CP, mientras que tan solo la prueba a 10 mA ha polarizado. En los blancos en agua, el máximo en voltaje se ha obtenido a los 2 mA, mientras que el mínimo se ha obtenido a los 5 mA.

6.4.3. Cronopotenciometrías de las placas con interfase salina

A continuación se presentan los resultados de las CPs de las placas con interfase salina.

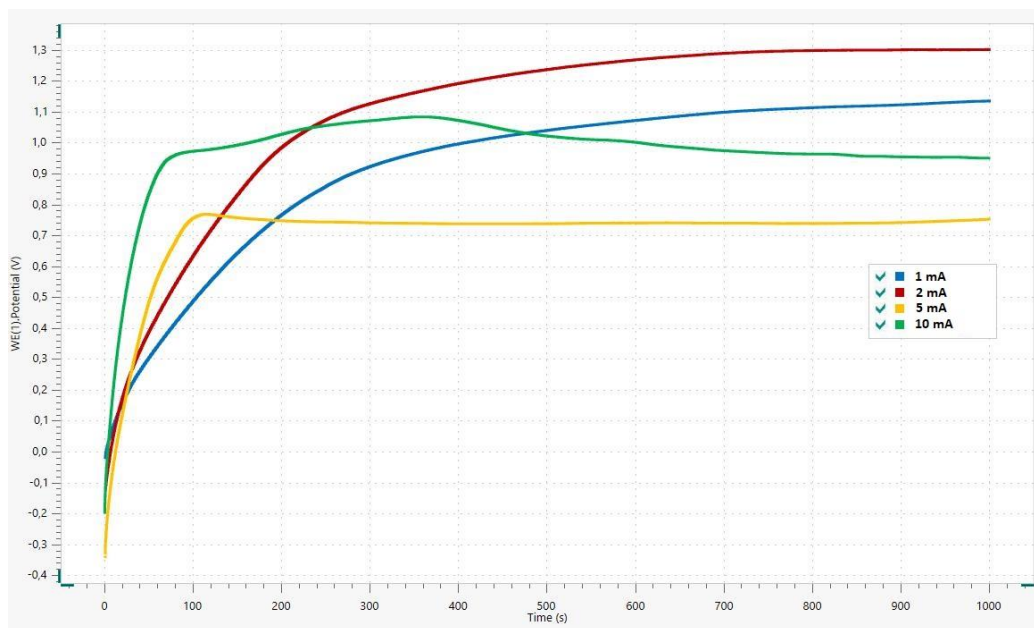


Figura 83. Resultados de las CPs a 1, 2, 5 y 10 mA de las placas con interfase salina.

Estas son las únicas placas que parecen haber soportado el proceso a todas las intensidades sin polarizarse. En este caso las pruebas que han devuelto un menor potencial han sido las de 5 mA, seguidas por las de 10 mA, a continuación las de 1 mA y finalmente, las pruebas a 2 mA en las que se ha obtenido el mayor potencial.

6.4.4. Cronopotenciometrías de las placas con interfase nanoporosa

A continuación se presentan los resultados de las CPs de las placas con interfase nanoporosa.

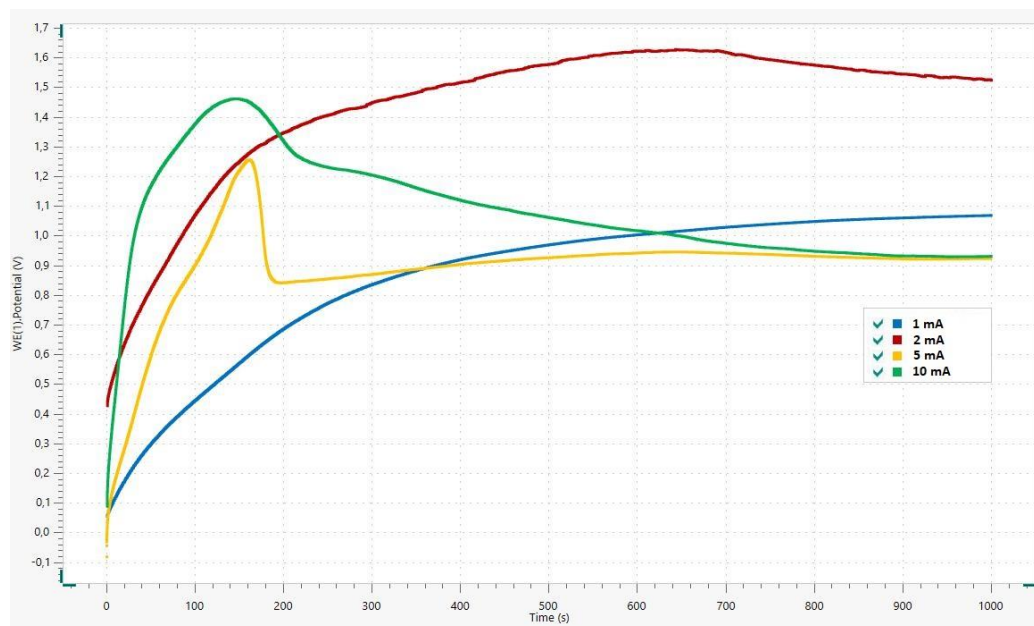


Figura 84. Resultados de las CPs a 1, 2, 5 y 10 mA de las placas con interfase nanoporosa.

En las placas con interfase nanoporosa tan solo se han obtenido dos resultados aceptables, las pruebas a 2 mA con el valor máximo de potencial y las pruebas a 1 mA con un valor inferior. Las muestras a 5 y a 10 mA han polarizado prácticamente en el mismo instante de tiempo, solo que a 10 mA lo ha hecho con un pico de potencial mayor.

6.4.5. Cronopotenciometrías a 1 mA

En este subapartado se presentan los resultados de las CPs a 1 mA de todas las placas.

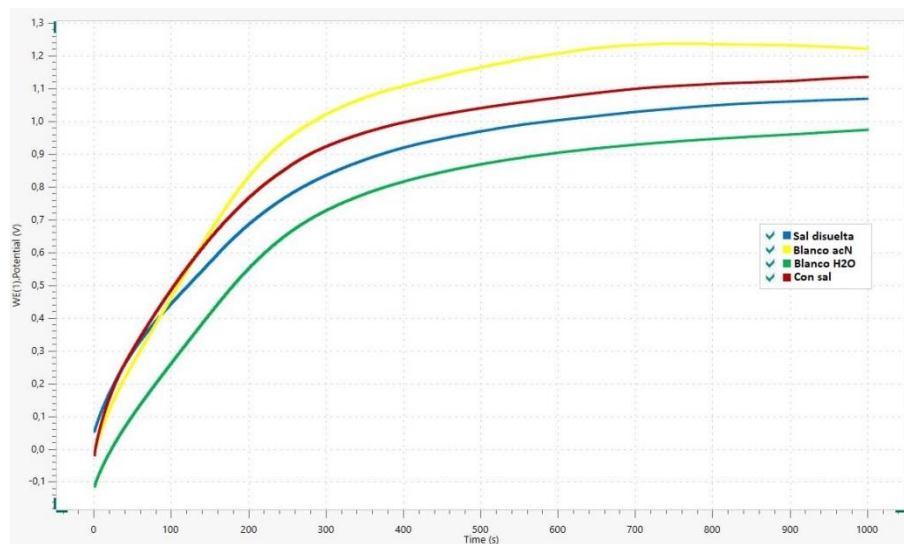


Figura 85. Resultados de las CPs a 1 mA.

A esta intensidad, los dos tipos de placas conservadas en agua (blancos en agua y las placas con interfase nanoporosa) han alcanzado un potencial inferior a las placas en acetonitrilo (blancos en acetonitrilo y con interfase salina). Los blancos correspondientes ocupan las posiciones más externas mientras que las placas con interfase ocupan las posiciones intermedias.

6.4.6. Cronopotenciometrías a 2 mA

En este subapartado se presentan los resultados de las CPs a 2 mA de todas las placas.

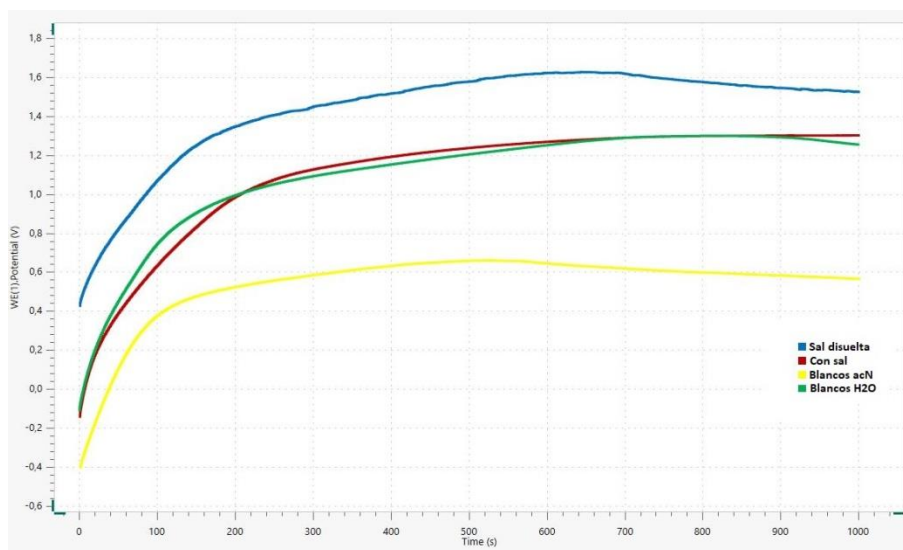


Figura 86. Resultados de las CPs a 2 mA.

En este caso, los resultados cambian respecto las muestras a 1 mA, ya que los blancos en acetonitrilo han experimentado una respuesta de potencial mucho menor que el resto de placas. Los blancos en agua y las placas con interfase salina muestran unos resultados muy parecidos a esta intensidad, con un potencial inferior al obtenido en las placas con interfase nanoporosa, que han obtenido el resultado más elevado.

6.4.7. Cronopotenciometrías a 5 mA

En este subapartado se presentan los resultados de las CPs a 5 mA de todas las placas.

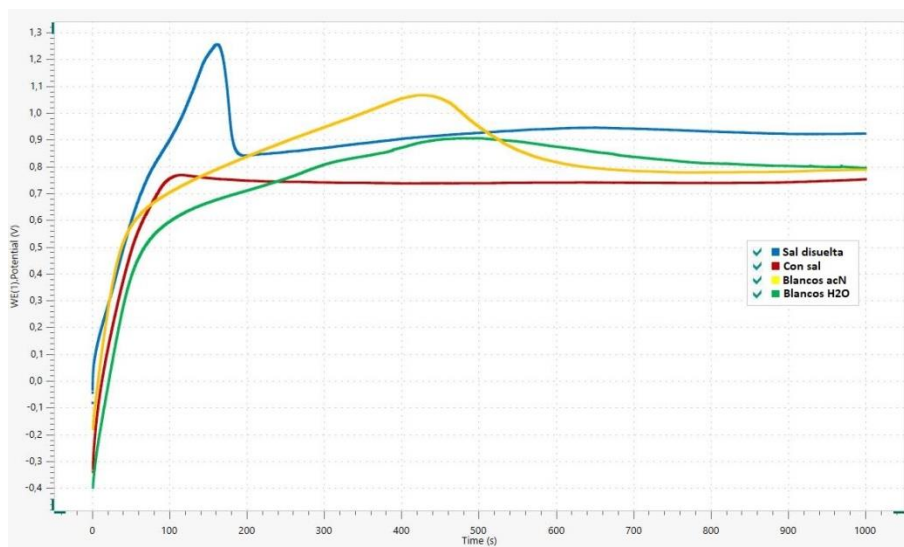


Figura 87. Resultados de las CPs a 5 mA.

En esta figura se observa la primera polarización, las placas con interfase nanoporosa sufren este proceso en un tiempo inferior a los 200 s. Los blancos en acetonitrilo parecen sufrir también una pequeña polarización entre los 400 y los 500 s. Por otra parte, tanto los blancos en agua y sobretodo las placas con interfase salina parecen resistir bien este valor de intensidad.

6.4.8. Cronopotenciometrías a 10 mA

En este subapartado se presentan los resultados de las CPs a 10 mA de todas las placas.

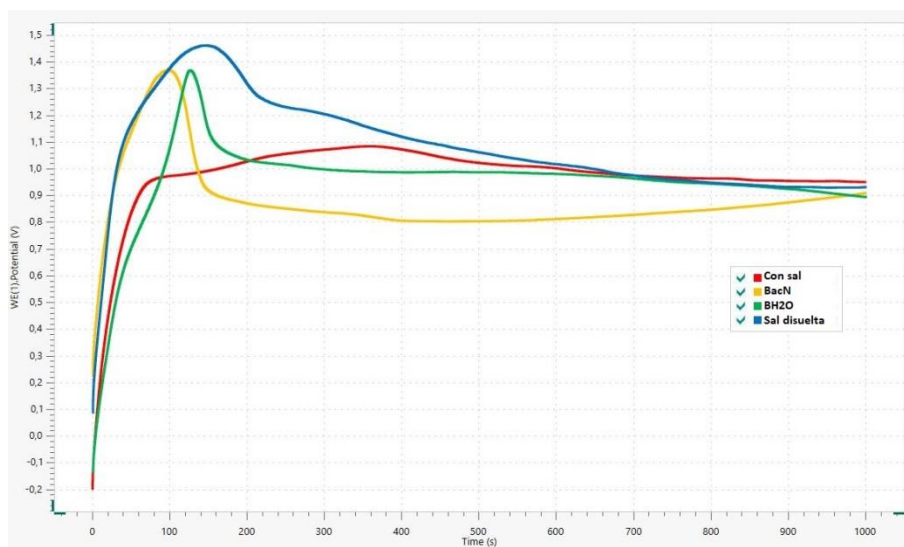


Figura 88. Resultados de las CPs a 10 mA.

A los 10 mA todas las placas se polarizan menos aquellas con interfase salina. Es destacable que todas las placas se polarizan aproximadamente a los 150 s. Estos resultados parecen coherentes con los obtenidos a los 5 mA, ya que las placas con interfase salina eran las que mejor soportaban esa intensidad.

6.4.9. Resumen de cronopotenciometrías

La Tabla 45 muestra el voltaje final para cada una de las pruebas, en el caso de que se haya producido una polarización se indica con un guion.

Tabla 45. Cuadro resumen de los resultados de las CPs.

Placa	Voltaje final (V)			
	1 mA	2 mA	5 mA	10 mA
BacN	1,22 V	0,57 V	-	-
BH2O	0,97 V	1,25 V	0,80 V	-
Con sal	1,14 V	1,30 V	0,75 V	0,95 V
Sal disuelta	1,07 V	1,52 V	-	-

Todas las placas alcanzan un potencial muy parecido a un mismo valor de intensidad a excepción de las muestras a 2 mA, a esta intensidad los blancos en acetonitrilo alcanzan un potencial muy inferior, el mínimo de todas las muestras. También es destacable que las placas con interfase salina son las únicas que aguantan una intensidad de 10 mA, el resto polariza a los 5 o 10 mA.

Las placas con interfase salina tienen la ventaja de que resisten bien un elevado rango de intensidades, por lo que su uso puede ser preferible en situaciones que haya que trabajar con intensidades altas. Por otro lado, las placas en agua muestran el comportamiento más robusto al trabajar con una intensidad de 2mA.

En este caso, el proceso de disolver la sal para la formación de nanoporos no ha implicado una mejora del sistema. Sin embargo, Tomando como referencia los ensayos de cronopotenciometría realizados a 1 mA, ya que es la intensidad a la que todas las muestras ensayadas permanecen sin alteración, es destacable, tal y como se observa en la Figura 85, que el sistema multicapa con interfase nanoperforada (sal disuelta) muestra una mejor respuesta a la intensidad aplicada. El potencial alcanzado por este sistema (1.06 V) es inferior a los análogos con sal en la interfase (1.14 V) y blanco (1.22 V), con lo cual cabría concluir que la capacidad de almacenamiento de carga de este sistema multicapa se ve incrementada al inducir una interfase central con nanohuecos.

6.5. Estudio morfológico

El objetivo de este estudio es observar los cambios provocados en la estructura del polímero en el proceso de formación de nanoporos. Para ello, se han elaborado cuatro muestras que posteriormente serán visualizadas en AFM y SEM. Las cuatro muestras son las siguientes:

1. Muestra de copolímero.
2. Muestra de copolímero con NaCl depositado.
3. Muestra de dos capas de copolímero con interfase salina.
4. Muestra de dos capas de copolímero con interfase nanoporosa.

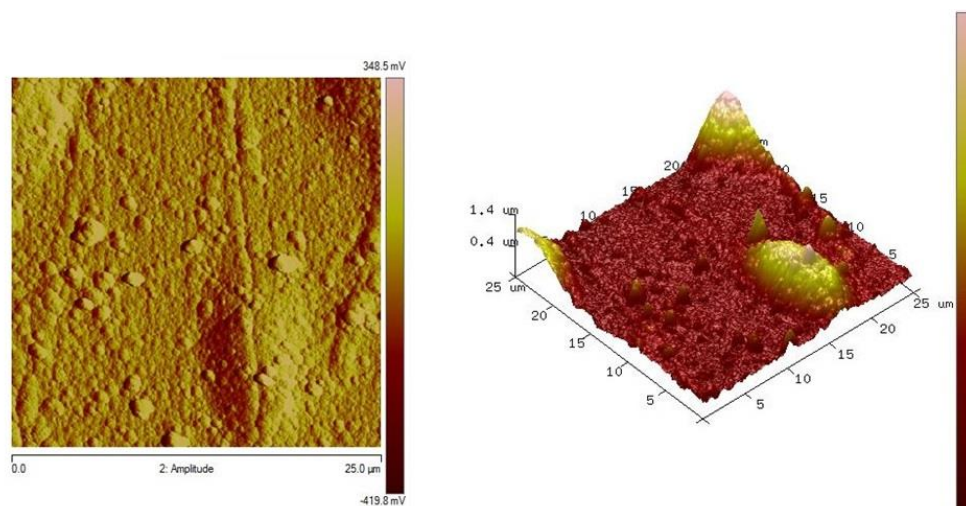
Las muestras consisten en pequeñas placas de 1 x 1 cm de acero AISI 316, la capa inicial está generada por CA limitado a 0,55 C, mientras que la capa superior ha sido generada a 0,2 C para facilitar la detección de los cristales de sal y de los nanoporos formados.

Tanto el estudio por AFM como por SEM han sido elaborados por el Centre de Recerca en Ciència i Enginyeria Multiescala de Barcelona de la UPC.

6.5.1. Microscopía de fuerzas atómicas (AFM)

Se ha escogido una región de 25 x 25 μm de cada una de las muestras para su visualización en AFM. La

Figura 89 presenta el AFM de la muestra de copolímero.



RUGOSIDAD: 220 nm

Figura 89. AFM de la muestra de copolímero.

La muestra tiene una rugosidad de 220 nm con una altura máxima de 1,4 μm . En la imagen del sensor de amplitud se puede observar el relieve de la muestra, en la que se encuentran pequeñas agrupaciones de copolímero en forma de grumos. La imagen 3D muestra que casi toda la superficie se encuentra a la misma altura pero que existen ciertas zonas muy concretas en las que se ha producido una elevación del terreno.

La Figura 90 presenta el AFM de la muestra de copolímero con NaCl depositado.

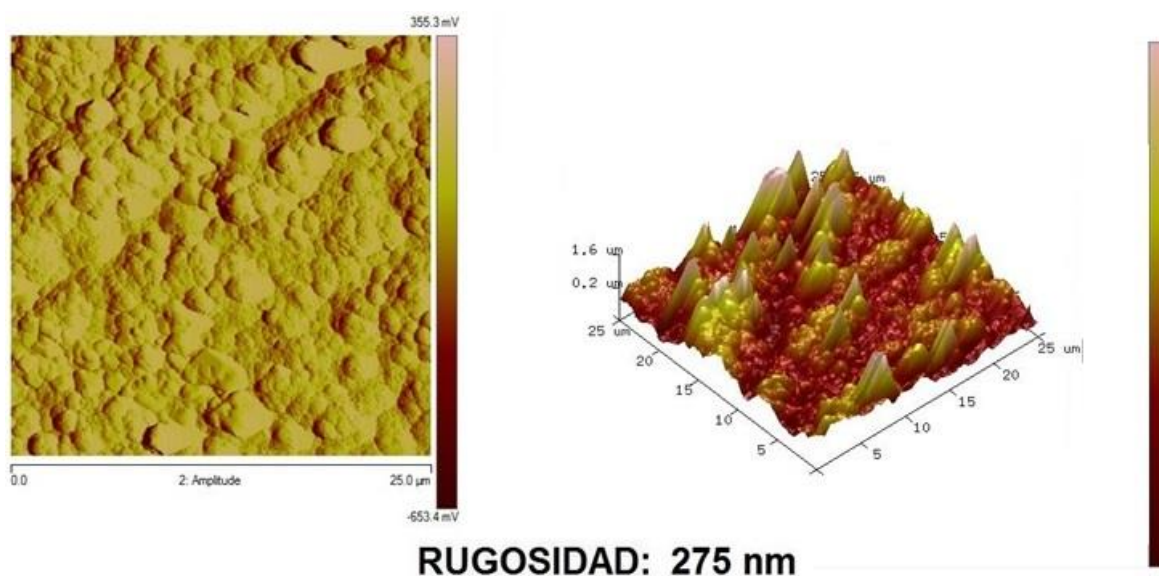


Figura 90. AFM de la muestra de copolímero con NaCl depositado.

La muestra tiene una rugosidad de 275 nm con una altura máxima de 1,6 μm , ambos valores son superiores a los obtenidos en la muestra anterior. Como se puede observar en la imagen 3D, se encuentra un mayor número de picos de desnivel.

La Figura 91 presenta el AFM de la muestra de copolímero con interfase salina.

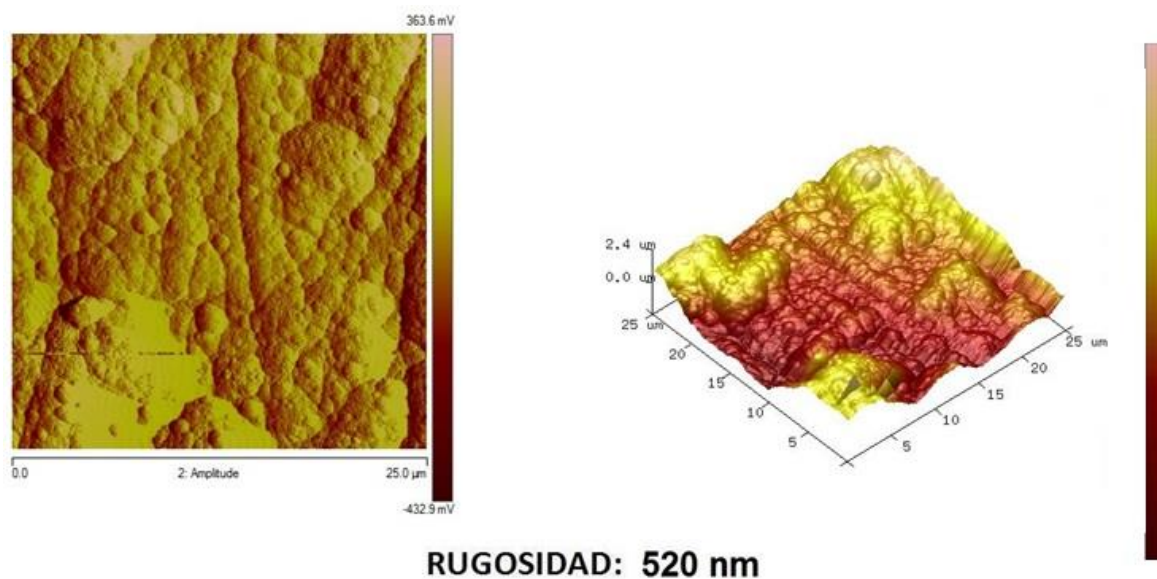


Figura 91. AFM de la muestra de copolímero con interfase salina.

La muestra tiene una rugosidad de 520 nm con una altura máxima de 2,4 μm . Estos resultados son mucho mayores a los obtenidos en los casos anteriores, esto puede ser debido a que parte de la segunda capa de copolímero se haya generado sobre algún cristal de sal. La imagen 3D muestra un número menor de picos que la muestra anterior, pero la diferencia de altura entre ellos es mucho mayor.

La Figura 92 presenta el AFM de la muestra de copolímero con interfase nanoporosa.

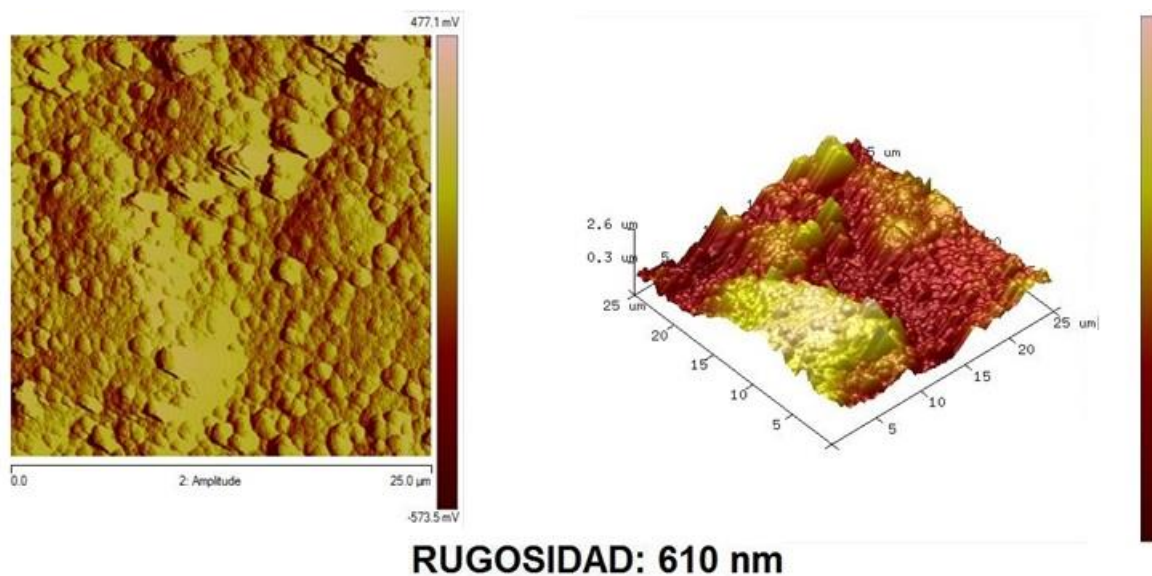


Figura 92. AFM de la muestra de copolímero con interfase nanoporosa.

Disolver la sal ha resultado en los valores máximos de rugosidad y de altura de todas las muestras, de 610 nm y 2,6 μm respectivamente. Estos valores pueden ser debidos a la formación de los nanoporos o surcos provocados al disolverse la sal.

Estos datos explican el valor elevado de la carga acumulada en los ciclos de CV debido a que la superficie de estas muestras es mayor, ya que la capacitancia es directamente proporcional a la superficie específica del sistema (ecuación 3.16).

Por los valores de rugosidad obtenidos se puede constatar que, efectivamente existe deposición de sal sobre la capa de copolímero inferior (Figuras 89 y Figura 90), de que existe crecimiento de copolímero sobre la capa de NaCl (Figura 91) y de que ha habido formación de nanohuecos tras el tratamiento con agua (Figura 92). Estos resultados se ven corroborados mediante la observación por SEM que se presenta en el siguiente apartado.

6.5.2. Microscopía electrónica de barrido (SEM)

En este apartado se presentan las imágenes más representativas obtenidas por el SEM. Todas las imágenes se encuentran en el Anexo B: Imágenes de SEM.

Se han usado dos sensores diferentes para capturar las imágenes, el SE2 y el inLens. El sensor inLens es capaz de captar electrones secundarios con alta eficiencia y es capaz de obtener imágenes de alto contraste a bajos voltajes y pequeñas distancias de trabajo. Por su parte el sensor SE2 capta electrones secundarios en los que la información topográfica es dominante.

La Figura 93 muestra la superficie del copolímero.

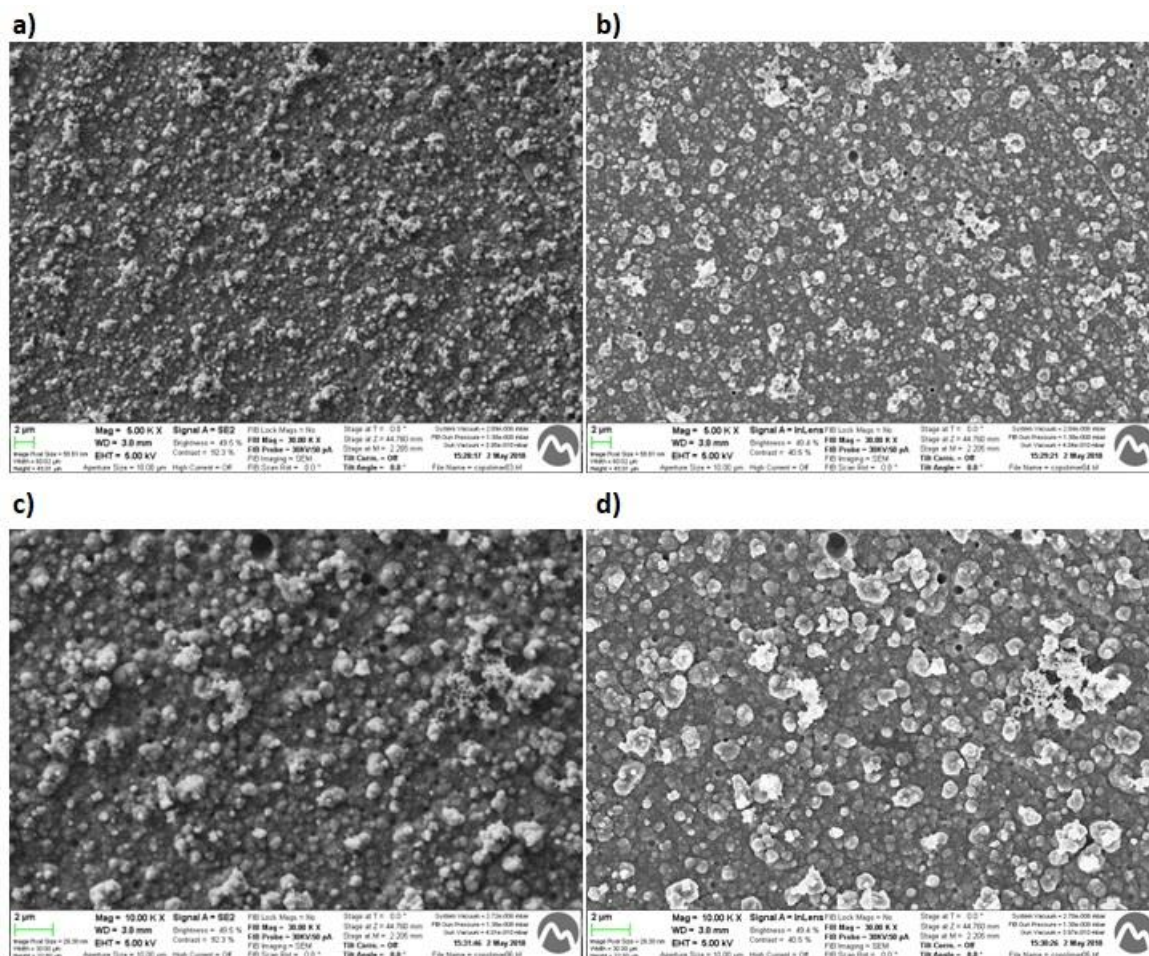


Figura 93. Imágenes de SEM de la muestra de copolímero a) SE2 a 5.000 aumentos b) inLens a 5.000 aumentos c) SE2 a 10.000 aumentos y c) inLens a 10.000 aumentos.

Los films presentan una superficie heterogénea en la que se distinguen dos fases, la más oscura que corresponde a la fase rica en PNMePy y la más clara que corresponde a la rica en PEDOT. Se observa que parte de la muestra presenta aglomeraciones de copolímero además de pequeños agujeros de un tamaño inferior a los 2 μm . Estos agujeros pueden haberse formado a causa de pequeñas burbujas de aire durante la generación.

La separación del copolímero en distintas fases ricas en PEDOT y PNMePy tiene una gran importancia en la capacitancia del sistema (apartado 3.2.6). Estas fases organizadas aleatoriamente actúan como una serie de nanocapacitores conectados en serie y en paralelo, esto aumenta la capacidad de almacenamiento de carga y además disminuye la distancia entre las capas exteriores de PEDOT.

La Figura 94 muestra un cristal de sal depositado sobre una capa de copolímero.

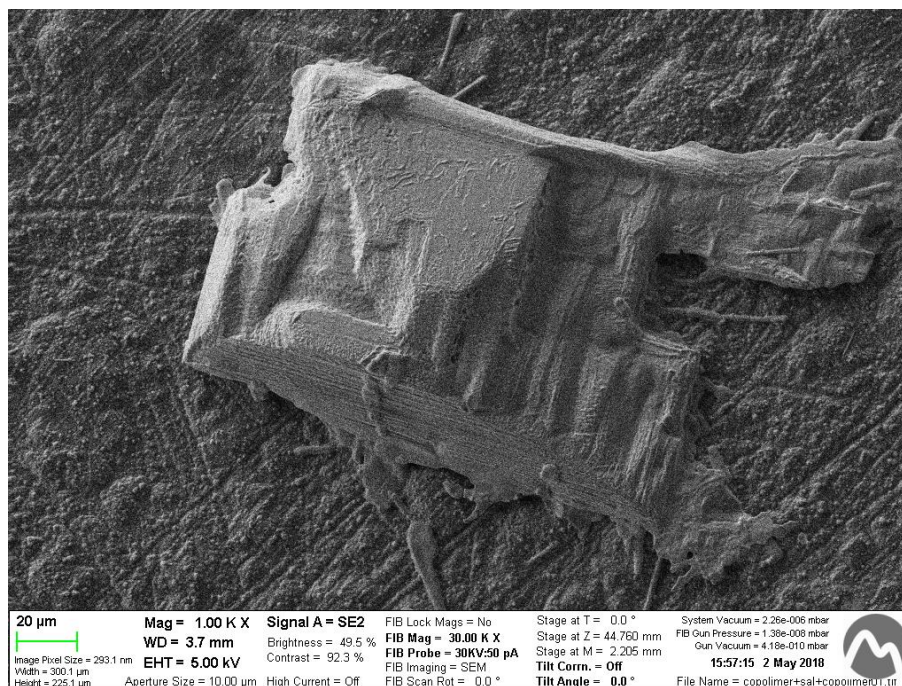


Figura 94. Imagen de SEM de un cristal de NaCl depositado en una capa de copolímero SE2 a 1.000 aumentos.

En la imagen se puede observar con facilidad la estructura cubica cristalina de la sal. El cristal tiene aproximadamente unas dimensiones de 175 x 116 μm . En este caso no hay copolímero generado sobre el cristal, en cambio en la Figura 95 se puede observar una pequeña cantidad de copolímero sobre un cristal de sal.

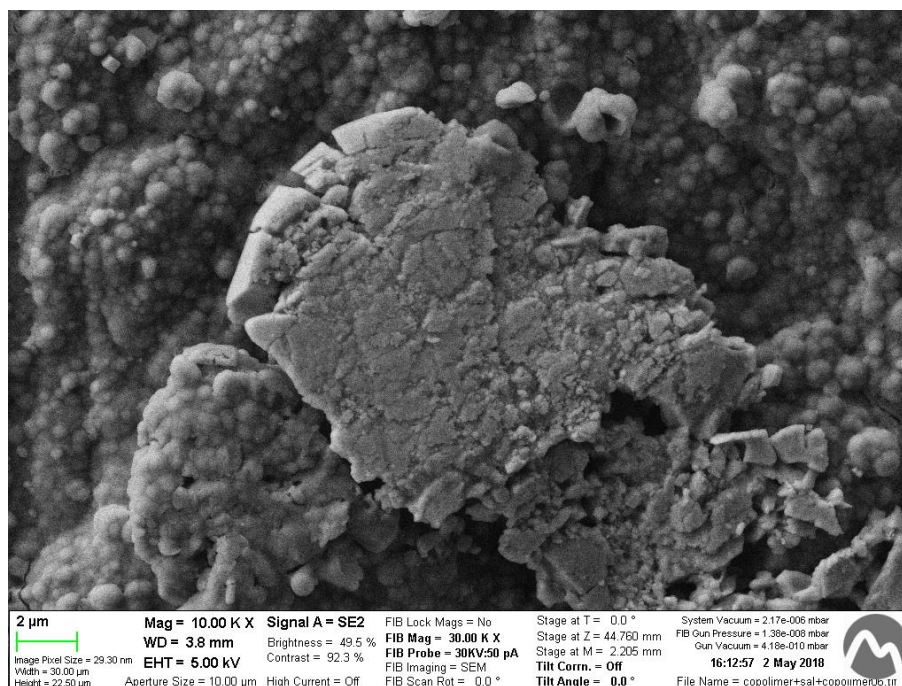


Figura 95. Imagen de SEM de generación de copolímero sobre un cristal de NaCl SE2 a 10.000 aumentos.

Finalmente, se presentan las imágenes de SEM en las que se observan nanoporos formados al diluir la sal.

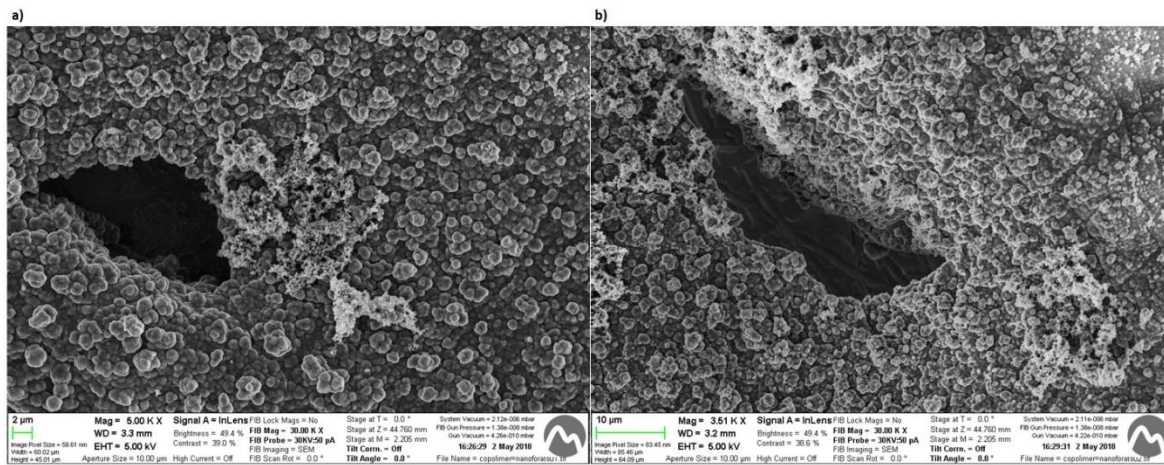


Figura 96. Imágenes de SEM de poros inLens a) 5.000 aumentos y b) 3.500 aumentos.

La Figura 96 muestra dos poros situados en la segunda capa de copolímero. En la Figura 96b se puede observar como el copolímero ha penetrado el poro. Las longitudes del poro son diferentes en ambos casos, en “a” tiene una medida aproximada de 20 µm y en “b” de 45 µm.

7. Análisis del impacto ambiental

Los residuos resultantes de las sesiones de laboratorio han de disponerse adecuadamente. Las disoluciones generadoras una vez agotadas, así como la disolución de LiClO_4 usada en las caracterizaciones, se verterán en el bidón de disolventes halogenados debido a la presencia de cloro en todas ellas.

Los residuos de limpieza se verterán en el contenedor de disolventes orgánicos no halogenados, debido a que su composición es principalmente de agua destilada, acetona y etanol.



Figura 97. Bidones para los residuos generados en el laboratorio.

El papel usado para secar se depositará en el cubo de reciclaje de papel, mientras que el papel sucio con restos de polímero o de otra sustancia se tirará en el contenedor de sólidos adsorbentes contaminados. El parafilm se depositará en el cubo de reciclaje de plásticos.

Los guantes una vez rotos o sucios se arrojarán en el contenedor de sólidos plásticos contaminados.



Figura 98. Contenedores de desechos de laboratorio.

Las puntas de la micropipeta se tiraran en el cubo de “puntos brutos”, mientras que las pipetas usadas para enrasar se tirarán al cubo de vidrio. Ambos recipientes están situados en la mesa de trabajo.



Figura 99. Cubos de reciclaje de pipetas y puntas de micropipeta.

Las botellas y envases de los compuestos químicos agotados se colocarán en las cajas dispuestas para ello.

Las láminas de acero inoxidable usadas se limpiarán a conciencia para su reutilización en futuros experimentos.

Conclusiones

Una vez elaborado el proyecto se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- Se ha logrado cumplir los objetivos iniciales del proyecto, obteniendo sistemas poliméricos multicapa con interfase nanoporosa y comparando su comportamiento eléctrico con el resto de muestras.
- Las placas de polímero obtenidas por cronoamperometría son uniformes y adherentes de manera que facilitan la electrogeneración de otras capas de polímero sobre ellas.
- Los iones de la sal añadida facilitan el paso de corriente produciendo una pequeña disminución del tiempo de generación necesario en la tercera capa respecto a esta misma capa sin sal para que el sistema alcance los 0,55 C.
- Se produce un incremento de rugosidad en las placas con interfase nanoporosa respecto al resto de muestras que ha sido corroborado por microscopía AFM.
- El proceso utilizado es válido para depositar cristales de NaCl y la posterior formación de nanoporos ya que ambos son observables con microscopía SEM.
- El proceso utilizado para obtener nanoporos es sencillo y económico, ya que solo requiere sumergir la primera capa de copolímero en una disolución de agua con sal durante 10 s y dejar secar.
- Los blancos pueden ser usados al finalizar su generación mientras que las placas con interfase nanoporosa necesitan pasar unas horas sumergidos en agua antes de su uso para asegurar la disolución de la sal.
- Es preferible conservar los blancos en acetonitrilo ya que al finalizar los 50 ciclos de ciclovoltamperometrías la carga acumulada es superior con un LEA similar a los conservados en agua.
- Añadir una interfase nanoperforada a los capacitadores ha repercutido en una mayor carga eléctrica acumulada al finalizar los 50 ciclos de ciclovoltamperometrías debido al incremento en la superficie específica.
- La formación de nanoporos en el film ha representado una mejora en el proceso, ya que se obtiene una carga acumulada mayor con un desgaste inferior.
- Las cronopotenciometrías han demostrado que las placas con interfase nanoporosa tienen menor resistencia a la oxidación que las placas con interfase salina ya que polarizan a los 5 y 10 mA.
- En las cronopotenciometrías realizadas a 1 mA, en la cual todas las muestras permanecen sin alteración, el sistema multicapa con interfase nanoperforada muestra una mejor respuesta a la intensidad aplicada.

Presupuesto

En este apartado se detalla el presupuesto del proyecto. A continuación se cuantifican los costes del material, de los reactivos, del personal y del equipo, así como los costes de alquiler del laboratorio, del AFM y del SEM. En el caso del coste correspondiente al equipo, se tendrá en cuenta el tiempo de utilización así como su amortización.

7.1. Costes de material de laboratorio

Tabla 46. Coste del material de laboratorio (Fuentes : Tecnylab 2018 y Labbox 2018)

Material	Cantidad	Coste unitario	Coste total
Pesasustancias	1	14,90 €	14,90 €
Matraz aforado de 50 mL	2	2,76 €	5,52 €
Vaso de precipitados de 100 mL	2	0,67 €	1,34 €
Vaso de precipitados de 500 mL	1	1,08 €	1,08 €
Celda electrolítica	2	220,00 €	440,00 €
Lamina de acero inoxidable AISI 316 1x15 cm	8	10,00 €	80,00 €
Electrodo de referencia de AgCl en KCl	1	164,56 €	164,56 €
Burbujeador de gas inerte de vidrio	1	121,19 €	121,19 €
Espátula	1	3,23 €	3,23 €
Pipeta Pasteur	1	0,20 €	0,20 €
Micro pipeta 10-100 µL	1	100,35 €	100,35 €
Cables y pinzas	3	6,60 €	19,80 €
Pinzas de madera	8	0,13 €	1,04 €
Tubos de ensayo	8	0,30 €	2,40 €
Gradilla para tubos de ensayo	1	6,92 €	6,92 €
Pipeta graduada de 50 mL	1	13,71 €	13,71 €
Frasco de vidrio	1	0,39 €	0,39 €
		Total	976,63 €

7.2. Coste de reactivos

Tabla 47. Coste de los reactivos (Fuente: Sigma-Aldrich 2018).

Reactivo	Cantidad usada	Cantidad por unidad	Coste unitario	Coste total
Acetonitrilo	4,5 L	2 L	205,00 €	615,00 €
Perclorato de litio	32,04 g	50 g	210,00 €	210,00 €
EDOT	2,13 g	10 g	67,20 €	67,20 €
NMePy	0,663 mL	100 mL	28,80 €	28,80 €
Acetona	7,5 L	5 L	27,43 €	137,5 €

Reactivo	Cantidad usada	Cantidad por unidad	Coste unitario	Coste total
Etanol	7,5 L	5 L	24,28 €	121,4 €
Cloruro de sodio	20 g	250 g	36,50 €	36,50 €
			Total	1.216,40 €

7.3. Coste de equipo

Para cuantificar el coste del equipo se tiene en cuenta su uso y su amortización. Se ha considerado una vida útil de 10 años para cada uno de los aparatos en un único pago.

$$\text{Coste amortizado} = \frac{\text{Coste total}}{\text{Vida útil}} \cdot \text{tiempo utilizado} \quad (\text{Ec. 7.1})$$

El tiempo de utilización es constante para cada concepto y corresponde a los 4 meses de trabajo en laboratorio. Los costes amortizados calculados se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 48. Coste total amortizado del equipo.

Concepto	Coste	Coste amortizado
Balanza analítica	1.318,90 €	43,96 €
Potenciostato	5.000,00 €	166,67 €
Ordenador	600,00 €	20,00 €
Total		230,63 €

7.4. Coste de personal

Se ha considerado el sueldo de un técnico de laboratorio para calcular el presupuesto de cada uno de los procesos del proyecto. Se ha estimado un sueldo de unos 10,42 € basándose en el boletín oficial del estado del Ministerio de Empleo y Seguridad Social del 30 de enero de 2017 (Ministerio de Educación 2017).

Tabla 49. Coste de personal.

Proceso	Horas	Coste
Experimentación	240 h	2.500,80 €
Búsqueda bibliográfica	20 h	208,40 €
Tratamiento de datos	150 h	1.563,00 €
Redacción de la memoria	100 h	1.042,00 €
Total		5.314,20 €

7.5. Costes de alquiler

El precio del uso del AFM y del SEM corresponde al marcado por el Centre de Recerca en Ciència i Enginyeria Multiescala de Barcelona de la UPC (CRNE 2018). El AFM ha sido usado durante cuatro horas mientras que el SEM ha sido usado durante dos. Por su parte, el laboratorio ha sido usado durante un total de cuatro meses.

Tabla 50. Coste de los servicios de alquiler.

Concepto	Coste	Coste total
Alquiler del laboratorio	300 €/mes	1.500 €
AFM	31,74 €/h	126,96 €
SEM	106,74 €/h	213,48 €
	Total	1.840,44 €

7.6. Coste total

A continuación se presenta el presupuesto final del proyecto. Primeramente, observamos el coste de los diferentes apartados del proyecto.

Tabla 51. Suma de los costes del proyecto.

Concepto	Coste
Material	976,63 €
Reactivos	1.216,40 €
Equipo	230,63 €
Personal	5.314,20 €
Alquiler	1.840,44 €
Total	9.578,30 €

A partir de este valor, se ha considerado un coste extra del 5% para los posibles imprevistos que puedan surgir así como un 21% de IVA.

Tabla 52. Presupuesto final del proyecto.

Concepto	Coste
Total	9.578,30 €
Imprevistos	478,92 €
IVA	2.011,44 €
Coste Final	12.068,66 €

El coste final del proyecto con impuestos incluidos es de 12.068,66 €. A continuación se muestra en un gráfico circular el porcentaje que representa cada concepto en el total del coste del proyecto.

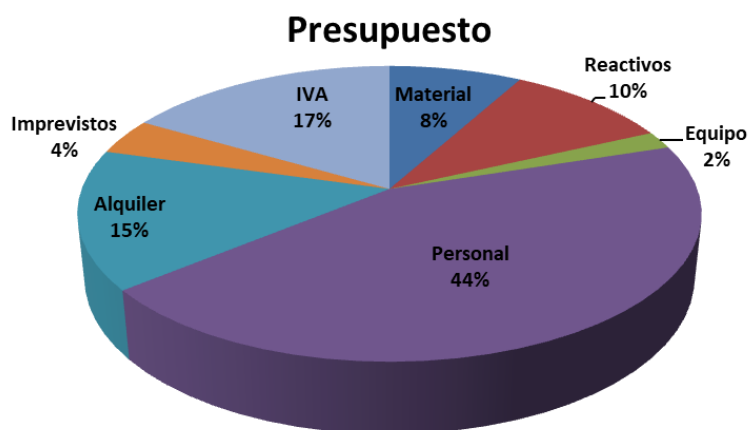


Figura 100. Grafico circular de los costes de elaboración del proyecto.

Como se puede observar, la mayor parte del presupuesto se va en el personal, debido a la cantidad de horas de trabajo. El equipo, pese a tener un valor inicial elevado, al aplicar las amortizaciones su coste disminuye considerablemente.

Bibliografía

- Ates, Murat, Tolga Karazehir, and A. Sezai Sarac Istanbul. 2012. "Conducting Polymers and Their Applications." *Current Physical Chemistry* 2 (January): 224–40. doi:10.4028/www.scientific.net/MSF.42.207.
- Axiom Chemicals Private Limited. 2018. "Lithium Perchlorate." Accessed April 2. <http://www.axiomchemind.com/lithium-perchlorate.html>.
- Bakhmatyuk, B. P., B. Ya Venhryn, I. I. Grygorchak, M. M. Micov, and S. I. Mudry. 2007. "Intercalation Pseudo-Capacitance in Carbon Systems of Energy Storage." *Reviews on Advanced Materials Science* 14 (2): 151–56.
- Borneo, Rafael. 2018. "Clases de Química: Celdas Galvanicas Y Electroliticas." Accessed March 29. <http://clasesdequimica.blogspot.com.es/2012/06/celdas-galvanicas-y-electroliticas.html>.
- Borras, Nuria, Francesc Estrany, and Carlos Alemán. 2017. "Nanophase-Segregation in the Dielectric Layer Enhances the Charge Storage Capacity of Polymeric Electrochemical Supercapacitors." *Organic Electronics: Physics, Materials, Applications* 51: 322–31. doi:10.1016/j.orgel.2017.09.034.
- Bott, Adrian W. 2000. "Controlled Current Techniques." *Current Separations* 18 (4): 125–27.
- Bourzac, Katherine. 2009. "Nanocondensadores Con Gran Almacenamiento de Energía | MIT Technology Review." <https://www.technologyreview.es/s/324/nanocondensadores-con-gran-almacenamiento-de-energia>.
- Byju's Chemistry. 2018. "Properties And Reactions of Ethanol | Specific Gravity Of Alcohol." Accessed April 2. <https://byjus.com/chemistry/ethanol/>.
- Calabozo, Juan Luis, Xavier Vilanova, Salas Fecha, Rueda, Melika Roknsharifi, Universidad Autónoma de Barcelona, Autor Luis, et al. 2013. "Departamento de Física Proyecto Fin de Carrera Autor : Adrián Sánchez García." *Metrohm Autolab.B.V* 3 (May): 1–3.
- Cheng, Tian Ze, and Mahir Tuli. 2014. "Dissolving Lithium Perchlorate in Prepolymers for Easier and Cheaper Propellant Manufacture." *International Journal of Aerospace Sciences* 3 (1): 1–5. doi:10.5923/j.aerospace.20140301.01.
- Choy M. Marisela. 2008. "Polimeros Conductores Como Alternativa Tecnológica En La Protección de Nuestro Ambiente." *Vasa*. <http://medcontent.metapress.com/index/A65RM03P4874243N.pdf>.
- Clae, M. 2012. "Condensadores." *Artículo* Edicion 4: 55. <http://profesores.sanvalero.net/~w0320/TEMA 4.pdf>.
- Collins, Darleen. 2016. "Scanning Tunneling Microscopy and Atomic Force Microscopy." <http://slideplayer.com/slide/6856881/>.
- Crespo, Gema Rodríguez. 2013. "Microscopía de Fuerza Atómica (AFM), (AFM) Modos de

Operación Y Aplicaciones.”

CRNE. 2018. “Quadre Resum de Tarifes,” 31.

Elgrishi, Noémie, Kelley J. Rountree, Brian D. McCarthy, Eric S. Rountree, Thomas T. Eisenhart, and Jillian L. Dempsey. 2017. “A Practical Beginner’s Guide to Cyclic Voltammetry.” *Journal of Chemical Education*, acs.jchemed.7b00361. doi:10.1021/acs.jchemed.7b00361.

Estrany Coda, Francesc, Carlos Alemán Llansó, Elaine Armerlin Diggroc, and Jordi Casanovas Salas. 2011. “Nuevas Aplicaciones de Los Polímeros Conductores.” *Técnica Industrial, ISSN 0040-1838, N° 291, 2011, Págs. 24-33, no. 291: 24–33.*

Evans, Paul. 2009. “New Nanoscale Supercapacitor Can Store 100 Times More Energy.” <https://newatlas.com/nanoscale-supercapacitor/11297/>.

García, Jorge. 2018. “Electroquímica Química General E Inorgánica (UNNOBA).” Accessed March 29. <https://es.slideshare.net/normagonzalez/aelectroquímica1794>.

Gil Mera, Isaac. 2009. “Diseño de Un Sistema de Almacenamiento de Energía Híbrido Basado En Baterías Y Supercondensadores Para Su Integración En Microredes Eléctricas,” 20–31. <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/4740/fichero/2.+Baterias+y+Supercondensadores.pdf>.

Goodfellow. 2018. “Acero Inoxidable - AISI 316 - Catalogo En Linea - Materiales En Pequeñas Cantidades Para El Diseño.” Accessed April 18. <http://www.goodfellow.com/S/Acero-Inoxidable-AISI-316.html>.

Heeger, A. J., S. Kivelson, J. R. Schrieffer, and W. -P. Su. 1988. “Solitons in Conducting Polymers.” *Reviews of Modern Physics* 60 (3). American Physical Society: 781–850. doi:10.1103/RevModPhys.60.781.

Jan, Arif Tasleem, Mudsser Azam, Kehkashan Siddiqui, Arif Ali, Inho Choi, and Qazi Mohd Rizwanul Haq. 2015. “Heavy Metals and Human Health: Mechanistic Insight into Toxicity and Counter Defense System of Antioxidants.” *International Journal of Molecular Sciences* 16 (12): 29592–630. doi:10.3390/ijms161226183.

Jangid, Nirmala Kumari, Narendra Pal Singh Chauhan, Kiran Meghwal, and Pinki B. Punjabi. 2014. “Conducting Polymers and Their Applications.” *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences* 5 (3): 383–412. doi:10.2174/1877947611202030224.

JEOL. 2006. “Scanning Electron Microscope A To Z.” *Serving Advanced Technology*, 32. doi:10.1017/S1431927605507797.

Jiménez, Margarita Sánchez. 2017. “Polímeros Conductores Electrogenados . Verificación de Parámetros de Aplicación Tecnológica.”

Kasap, S O, Electrical Engineering Materials, B G Streetman, and R Pierret. 2000. “Temperature Dependence of Semiconductor Conductivity.” *Materials Engineering*, 1–10. http://www.google.com/url?sa=t&source=web&cd=1&ved=0CB0QFjAA&url=http://www.engr.sjsu.edu/sbates/images/materials&plastics/tech_LN08_semiconductorresistance.doc&rct=j&q=TemperatureDependenceofSemiconductor

Conductivity&ei=_RENTsvvA8rsrQfqva3UCw&usg=AFQ.

Khan Academy. 2018. "Molecules and Compounds." Accessed April 2. <https://www.khanacademy.org/science/chemistry/atomic-structure-and-properties/introduction-to-compounds/a/paul-article-2>.

Labbox. 2018. "Labbox Suministrador Low Cost de Material Laboratorio, Materiales de Laboratorio." Accessed April 18. <https://www.labbox.com/es/>.

López, Enrique A., and Santiago D. Solares. 2014. "El Microscopio de Fuerza Atómica: Métodos Y Aplicaciones." *Revista de La Universidad Del Valle Guatemala*.

Luis Farrera G. 2014. "Conductores, Semiconductores Y Aislantes," 1–8.

Mantione, Daniele, Isabel del Agua, Ana Sanchez-Sanchez, and David Mecerreyes. 2017. "Poly(3,4-Ethylenedioxythiophene) (PEDOT) Derivatives: Innovative Conductive Polymers for Bioelectronics." *Polymers* 9 (8). doi:10.3390/polym9080354.

Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. 2017. "Boletín Oficial Del Estado," 72216. doi:BOE-A-2012-5403.

MIT. 2018. "Capacitance and Dielectrics." Accessed April 15. <http://web.mit.edu/viz/EM/visualizations/coursenotes/modules/guide05.pdf>.

Mitlyng, Benjamin L, and Robert a Ganz. 2012. "Understanding the GERD." *Minnesota Medicine* 95 (4): 42–45. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22685899>.

Olafisoye, O.B., T Adefioye, and O.A. Osibote. 2013. "Heavy Metals Contamination of Water, Soil and Plants around an Electronic Waste Dumpsite." *Polish Journal of Environmental Studies* 22 (5): 1431–39.

Ortiz Fuentes, Luis. 2013. "Desarrollo de Un Potenciostato Para La Adquisición Y Tratamiento de La Señal de Biosensores Enzimáticos," 1–74.

Otero, Toribio Fernández. 2003. "Polimeros Conductores: Sintesis, Propiedades Y Aplicaciones Electroquímicas." *Revista Iberoamericana de Polímeros* 4 (4): 1–32.

Premium Solvents LLC. 2018. "Buy Acetonitrile, ACS, 99.5+%." Accessed April 2. <https://premiumsolvents.com/product/buy-acetonitrile-accs-99-5/>.

Pyshkina, Olga. 2010. "Poly(3,4-Ethylenedioxythiophene): Synthesis and Properties." *Scientific Journal of Riga Technical University Material Science and Applied Chemistry* 21: 51–54. doi:10.1039/c2jm32457a.

Pyun, Su-Il, Heon-Cheol Shin, Jong-Won Lee, and Joo-Young Go. 2012. "Electrochemistry of Insertion Materials for Hydrogen and Lithium." doi:10.1007/978-3-642-29464-8.

Quimitube. 2018. "Teoría de Bandas Para La Explicación Del Enlace Metálico." Accessed April 1. <http://www.quimitube.com/videos/enlace-metalico-teoria-de-bandas>.



- Renewable Fuels Association. 2015. "Pocket Guide to Ethanol 2015," 1–18. http://ethanolrfa.3cdn.net/23d732bf7dea55d299_3wm6b6wwl.pdf.
- Sarhan, Abdelwareth A. O., and Carsten Bolm. 2009. "Iron(iii) Chloride in Oxidative C–C Coupling Reactions." *Chemical Society Reviews* 38 (9). The Royal Society of Chemistry: 2730. doi:10.1039/b906026j.
- SAS. 2004. "Conductivity-Theory and Practice." *Analytical Radiometer* D61M002: 1–50. <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Conductivity+Theory+and+Practice#4> <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Conductivity-theory+and+practice#0>.
- Saucedo, Ladislao. 2010. "C Ondensadores E Léctricos." *Artículo Tercero*: 44. http://www.rtrenergia.es/downloads/condensadores_2012.pdf.
- SCAI. 2018. "Unidad de Microscopía Electrónica de Barrido Unidad de Microscopía Electrónica de Barrido." http://www.scai.uma.es/servicios/area_microscopia/sem/sem.html.
- Sigma-Aldrich. 2018a. "3,4-Ethylenedioxythiophene 97%." Accessed April 2. <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/483028?lang=es®ion=ES>.
- Sigma-Aldrich. 2018b. "Acetone Solution Certified Reference Material, 2000 µg/mL in Methanol: Water (9:1)." Accessed April 2. <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/supelco/48358?lang=es®ion=ES>.
- Sigma-Aldrich. 2018c. "N-Methylpyrrole 99%." Accessed April 2. https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/m78801?lang=es®ion=ES&gclid=EA1a1QobChMI38atuJ_s2QIVURgbCh2IBQQPEAAAYASAAEgJoa_D_BwE.
- Sigma-Aldrich. 2018d. "N-Methylpyrrole 99% | Sigma-Aldrich." Accessed March 31. https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/m78801?lang=es®ion=ES&gclid=EA1a1QobChMI2JnJsoiX2glVcTPTChOE5wsKEAAAYASAAEgKo_PD_BwE.
- Simon, P, and A Burke. 2008. "Nanostructured Carbons: Double-Layer Capacitance and More." *Electrochemical Society Interface* 17 (1): 38–43. doi:10.1016/j.carbon.2005.06.046.
- Tecnylab. 2018. "Suministros de Laboratorio | Material de Laboratorio | Equipo de Laboratorio |." Accessed April 18. <https://www.tecnylab.es/es/>.
- Tempowski, Bernice Schaddelee-Scholten; Joanna. 2017. "Recycling Used Lead-Acid Batteries: Health Considerations." *United Nations Environment Programme on Safe Management of Used Lead Acid Batteries*.
- Universidad politecnica de Madrid. 2010. "Química de Combustibles Y polímeros/Reacciones de Polimerización," 1–34. http://ocw.upm.es/ingenieria-quimica/quimica-de-combustibles-y-polimeros/Contenidos/Material_de_clase/qcyp-b5.pdf.
- University of Cambridge. 2018. "Linear Sweep and Cyclic Voltametry: The Principles — Department of Chemical Engineering and Biotechnology." Accessed March 5. <https://www.ceb.cam.ac.uk/research/groups/rg-eme/teaching-notes/linear-sweep-and-cyclic>

voltametry-the-principles.

UNT. 2016. "Materiales Eléctricos - Teoría de Bandas." *Universidad Nacional de Tucuman*, 1–7.

UPC. n.d. "Máster - Polímeros Electroactivos." In *Máster - Polímeros Y Biopolímeros*. Vol. 2.

UPC. n.d. "MÁSTER - POLÍMEROS Y BIOPOLÍMEROS" 1.

UPC. n.d. "Máster - Polímeros Y Biopolímeros - Polímeros Electroactivos."

Vandesteeg, Nathan. 2003. "Synthesis and Characterization of EDOT-Based Conducting Polymer Actuators." *Proceedings of SPIE* 5051 (May 2011): 349–56. doi:10.1117/12.484418.

Wang, C., T. M. Wang, and Q. H. Wang. 2013. "Low-Dielectric, Nanoporous Polyimide Thin Films Prepared from Block Copolymer Templating." *Express Polymer Letters* 7 (8): 667–72. doi:10.3144/expresspolymlett.2013.63.

Wang, Zerong (Daniel Zerong), Uta Wille, and Eusebio Juaristi. 2018. *Encyclopedia of Physical Organic Chemistry*. Accessed March 26. [https://books.google.es/books?id=qYebCgAAQBAJ&pg=PA3530&lpg=PA3530&dq=WALATKA,+LABES+Y+PERISTEIN&source=bl&ots=X_9ZZmTMIY&sig=4CorqMubZd8u1vbKZFmq4bqH_lw&hl=es&sa=X&ved=0ahUKEwj_udi66lraAhUOlXQKHTmhCBsQ6AEIOTAC#v=onepage&q=WALATKA%20C%20LABES+Y+PERISTEIN&f=false](https://books.google.es/books?id=qYebCgAAQBAJ&pg=PA3530&lpg=PA3530&dq=WALATKA,+LABES+Y+PERISTEIN&source=bl&ots=X_9ZZmTMIY&sig=4CorqMubZd8u1vbKZFmq4bqH_lw&hl=es&sa=X&ved=0ahUKEwj_udi66lraAhUOlXQKHTmhCBsQ6AEIOTAC#v=onepage&q=WALATKA%20C%20LABES%20Y%20PERISTEIN&f=false).

Anexo A: Fichas de seguridad

A1. 3,4-Etilendioxitiofeno (EDOT)

Safety Data Sheet
acc. to OSHA HCS



Page 1/5
Printing date 10/18/2016
Revision date 10/17/2016

1 Identification

Product identifier
Product name: 3,4-Ethylenedioxythiophene

Stock number: H50533
CAS Number: 120213-50-1
EC number: 003-128-0

Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against:
Identified use: SU24 Scientific research and development

Details of the supplier of the safety data sheet
Manufacturer/Supplier:
Alfa Aesar
Thermo Fisher Scientific Chemicals, Inc.
30 Bond Street
Ward Hill, MA 01835-8099
Tel: 800-343-0500
Fax: 800-322-4757
Email: tech@alfa.com
www.alfa.com
Information Department: Health, Safety and Environmental Department
Emergency telephone number:
During normal business hours (Monday-Friday, 8am-7pm EST), call (800) 343-0500. After normal business hours, call Carechem 24 at (866) 926-0780.

2 Hazard(s) identification

Classification of the substance or mixture in accordance with 29 CFR 1910 (OSHA HCS)

 GHS07

Acute Tox. 4 H302 Harmful if swallowed.
Acute Tox. 4 H312 Harmful in contact with skin.
Eye Irrit. 2A H310 Causes serious eye irritation.
Hazards not otherwise classified No information known.

Label elements
GHS label elements The product is classified and labeled in accordance with 29 CFR 1910 (OSHA HCS)
Hazard pictograms

 GHS07

Signal word Warning

Hazard statements
H302+H312 Harmful if swallowed or in contact with skin.
H310 Causes serious eye irritation.

Precautionary statements
P280 Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection.
P264 Wash thoroughly after handling.
P270 Do not eat, drink or smoke when using this product.
P305+P351+P338 IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing.
P303+P361+P353 IF ON SKIN: Wash contaminated clothing before reuse.
P302+P352 IF ON SKIN: Wash with plenty of water.
P330 Rinse mouth.
P301+P312 IF SWALLOWED: Call a POISON CENTER/doctor if you feel unwell.
P501 Dispose of contents/container in accordance with local/regional/national/international regulations.

WHMIS classification
D1B - Toxic material causing immediate and serious toxic effects
D2B - Toxic material causing other toxic effects

Classification system
HMIS ratings (scale 0-4)
(Hazardous Materials Identification System)

Health (acute effects)	= 2
Flammability	= 1
Physical Hazard	= 1

Other hazards
Results of PBT and vPvB assessment
PBT: Not applicable.
vPvB: Not applicable.

3 Composition/information on ingredients

Chemical characterization: Substances
CAS# Description:
120213-50-1 3,4-Ethylenedioxythiophene
Identification number(s):
EC number: 003-128-0

USA
(Contd. on page 2)

4 First-aid measures**Description of first aid measures****After inhalation**

Supply fresh air. If required, provide artificial respiration. Keep patient warm.

Seek immediate medical advice.

After skin contact

Immediately wash with water and soap and rinse thoroughly.

Seek immediate medical advice.

After eye contact Rinse opened eye for several minutes under running water. Then consult a doctor.

After swallowing Seek medical treatment.

Information for doctor

Most important symptoms and effects, both acute and delayed

Harmful if swallowed.

Causes serious eye irritation.

Harmful in contact with skin.

Indication of any immediate medical attention and special treatment needed No further relevant information available.

5 Fire-fighting measures**Extinguishing media**

Suitable extinguishing agents Carbon dioxide, extinguishing powder or water spray. Fight larger fires with water spray or alcohol resistant foam.

Special hazards arising from the substance or mixture

If this product is involved in a fire, the following can be released:

Carbon monoxide and carbon dioxide

Sulfur oxides (SOx)

Advice for firefighters

Protective equipment:

Wear self-contained respirator.

Wear fully protective impervious suit.

6 Accidental release measures**Personal precautions, protective equipment and emergency procedures**

Wear protective equipment. Keep unprotected persons away.

Ensure adequate ventilation

Environmental precautions: Do not allow product to reach sewage system or any water course.

Methods and material for containment and cleaning up:

Absorb with liquid-binding material (sand, diatomite, acid binders, universal binders, sawdust).

Dispose of contaminated material as waste according to section 13.

Prevention of secondary hazards: No special measures required.

Reference to other sections

See Section 7 for information on safe handling

See Section 8 for information on personal protection equipment.

See Section 13 for disposal information.

7 Handling and storage**Handling****Precautions for safe handling**

Keep container tightly sealed.

Ensure good ventilation at the workplace.

Information about protection against explosions and fires: No information known.

Conditions for safe storage, including any incompatibilities**Storage**

Requirements to be met by storerooms and receptacles: Refrigerate

Information about storage in one common storage facility:

Protect from heat.

Store away from oxidizing agents.

Further information about storage conditions:

Keep container tightly sealed.

Refrigerate

Specific end use(s) No further relevant information available.

8 Exposure controls/personal protection**Additional information about design of technical systems:**

Properly operating chemical fume hood designed for hazardous chemicals and having an average face velocity of at least 100 feet per minute.

Control parameters

Components with limit values that require monitoring at the workplace:

The product does not contain any relevant quantities of materials with critical values that have to be monitored at the workplace.

Additional information: No data

Exposure controls**Personal protective equipment****General protective and hygienic measures**

The usual precautionary measures for handling chemicals should be followed.

Keep away from foodstuffs, beverages and feed.

Remove all soiled and contaminated clothing immediately.

Wash hands before breaks and at the end of work.

Avoid contact with the eyes.

Avoid contact with the eyes and skin.

Maintain an ergonomically appropriate working environment.

Breathing equipment: Use suitable respirator when high concentrations are present.

Recommended filter device for short term use:

Use a respirator with multi-purpose combination (US) or type ABEK (EN 14387) as a backup to engineering controls. Risk assessment should be performed to determine if air-purifying respirators are appropriate. Only use equipment tested and approved under appropriate government standards such as NIOSH (USA) or

CEN (EU).

Protection of hands:

Impervious gloves

Check protective gloves prior to each use for their proper condition.

The selection of suitable gloves not only depends on the material, but also on quality. Quality will vary from manufacturer to manufacturer.

Eye protection: Safety glasses

(Contd. on page 3)

USA

Body protection: Protective work clothing.		(Contd. of page 2)
9 Physical and chemical properties		
Information on basic physical and chemical properties		
General Information		
Appearance:		
Form:	Liquid	
Odor:	Not determined	
Odor threshold:	Not determined.	
pH-value:	Not determined.	
Change in condition		
Melting point/Melting range:	Not determined	
Boiling point/Boiling range:	193 °C (379 °F)	
Sublimation temperature / start:	Not determined	
Flash point:	104 °C (219 °F)	
Flammability (solid, gaseous)	Not determined.	
Ignition temperature:	Not determined	
Decomposition temperature:	Not determined	
Auto igniting:	Not determined.	
Danger of explosion:		
Explosion limits:	Not determined.	
Lower:	Not determined	
Upper:	Not determined	
Vapor pressure:	Not determined	
Density at 20 °C (68 °F):	1.331 g/cm³ (11.107 lbs/gal)	
Relative density:	Not determined.	
Vapor density:	Not determined.	
Evaporation rate:	Not determined.	
Solubility in / Miscibility with		
Water:	Not determined	
Partition coefficient (n-octanol/water):	Not determined.	
Viscosity:		
dynamic:	Not determined.	
kinematic:	Not determined.	
Other information	No further relevant information available.	
10 Stability and reactivity		
Reactivity No information known.		
Chemical stability Stable under recommended storage conditions.		
Thermal decomposition / conditions to be avoided: Decomposition will not occur if used and stored according to specifications.		
Possibility of hazardous reactions Reacts with strong oxidizing agents		
Conditions to avoid No further relevant information available.		
Incompatible materials:		
Oxidizing agents		
Heat		
Hazardous decomposition products:		
Carbon monoxide and carbon dioxide		
Sulfur oxides (SOx)		
11 Toxicological information		
Information on toxicological effects		
Acute toxicity:		
Harmful in contact with skin.		
Harmful if swallowed.		
Danger through skin absorption.		
LD/CC50 values that are relevant for classification: No data		
Skin irritation or corrosion: May cause irritation		
Eye irritation or corrosion: Causes serious eye irritation.		
Sensitization: No sensitizing effects known.		
Germ cell mutagenicity: No effects known.		
Carcinogenicity: No classification data on carcinogenic properties of this material is available from the EPA, IARC, NTP, OSHA or ACGIH.		
Reproductive toxicity: No effects known.		
Specific target organ system toxicity - repeated exposure: No effects known.		
Specific target organ system toxicity - single exposure: No effects known.		
Aspiration hazard: No effects known.		
Subacute to chronic toxicity: No effects known.		
Additional toxicological information: To the best of our knowledge the acute and chronic toxicity of this substance is not fully known.		
Carcinogenic categories		
OSHA-Ca (Occupational Safety & Health Administration) Substance is not listed.		
12 Ecological information		
Toxicity		
Aquatic toxicity: No further relevant information available.		
Persistence and degradability No further relevant information available.		
Bioaccumulative potential No further relevant information available.		
Mobility in soil No further relevant information available.		
Additional ecological information:		
General notes:		
Do not allow undiluted product or large quantities to reach ground water, water course or sewage system.		
Avoid transfer into the environment.		
Results of PBT and vPvB assessment		
PBT: Not applicable.		
vPvB: Not applicable.		
Other adverse effects No further relevant information available.		

13 Disposal considerations

Waste treatment methods
 Recommendation: Consult state, local or national regulations to ensure proper disposal.
 Uncleaned packagings:
 Recommendation: Disposal must be made according to official regulations.

14 Transport information

UN-Number DOT, IMDG, IATA	UN2810
UN proper shipping name DOT IMDG, IATA	Toxic, liquids, organic, n.o.s. (3,4-Ethylenedioxythiophene) TOXIC LIQUID, ORGANIC, N.O.S. (3,4-Ethylenedioxythiophene)
Transport hazard class(es) DOT	
Class	6.1 Toxic substances.
Label	6.1
Class	6.1 (Tf) Toxic substances
Label	6.1
IMDG, IATA	
Class	6.1 Toxic substances.
Label	6.1
Packing group DOT, IMDG, IATA	III
Environmental hazards:	Not applicable.
Special precautions for user EMS Number:	Warning: Toxic substances F+, S-A
Transport in bulk according to Annex II of MARPOL73/78 and the IBC Code	Not applicable.
Transport/Additional information:	
DOT Marine Pollutant (DOT):	No
UN "Model Regulation":	UN2810, Toxic, liquids, organic, n.o.s. (3,4-Ethylenedioxythiophene), 6.1, III

15 Regulatory information

Safety, health and environmental regulations/legislation specific for the substance or mixture
 GHS label elements: The product is classified and labeled in accordance with 29 CFR 1910 (OSHA HCS)
 Hazard pictograms



GHS07

Signal word: Warning

Hazard statements

H302+H312 Harmful if swallowed or in contact with skin.

H319 Causes serious eye irritation.

Precautionary statements

P201 Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection.

P264 Wash thoroughly after handling.

P270 Do not eat, drink or smoke when using this product.

P305+P351+P338 IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing.

P363 Wash contaminated clothing before reuse.

P321 Specific measures (see on this label).

P337+P313 If eye irritation persists: Get medical advice/attention.

P330 Rinse mouth.

P301+P312 IF SWALLOWED: Call a POISON CENTER/doctor if you feel unwell.

P501 Dispose of contents/container in accordance with local/regional/national/international regulations.

National regulations

All components of this product are listed in the U.S. Environmental Protection Agency Toxic Substances Control Act Chemical substance inventory.

All components of this product are listed on the Canadian Non-Domestic Substances List (NDSL).

SARA Section 313 (specific toxic chemical listings) Substance is not listed.

California Proposition 65

Prop 65 - Chemicals known to cause cancer Substance is not listed.

Prop 65 - Developmental toxicity Substance is not listed.

Prop 65 - Developmental toxicity, female Substance is not listed.

Prop 65 - Developmental toxicity, male Substance is not listed.

Information about limitation of use: For use only by technically qualified individuals.

Other regulations, limitations and prohibitive regulations

Substance of Very High Concern (SVHC) according to the REACH Regulations (EC) No. 1907/2006. Substance is not listed.

The conditions of restrictions according to Article 67 and Annex XVII of the Regulation (EC) No 1907/2006 (REACH) for the manufacturing, placing on the market and use must be observed.

Substance is not listed.

Annex XIV of the REACH Regulations (requiring Authorisation for use) Substance is not listed.

Chemical safety assessment: A Chemical Safety Assessment has not been carried out.

USA

16 Other information

Employers should use this information only as a supplement to other information gathered by them, and should make independent judgement of suitability of this information to ensure proper use and protect the health and safety of employees. This information is furnished without warranty, and any use of the product not in conformance with this Material Safety Data Sheet, or in combination with any other product or process, is the responsibility of the user.

Department Issuing SDS: Global Marketing Department

Date of preparation / last revision 10/18/2016 / -

Abbreviations and acronyms:

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road)

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods

DOT: US Department of Transportation

IATA: International Air Transport Association

EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances

CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)

HMIS: Hazardous Materials Identification System (USA)

WHMIS: Workplace Hazardous Materials Information System (Canada)

LC50: Lethal concentration, 50 percent

LD50: Lethal dose, 50 percent

vPvB: very Persistent and very Bioaccumulative

ACGIH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists (USA)

OSHA: Occupational Safety and Health Administration (USA)

NTP: National Toxicology Program (USA)

IARC: International Agency for Research on Cancer

EPA: Environmental Protection Agency (USA)

Acute Tox. 4: Acute toxicity, Hazard Category 4

Eye Irrit. 2A: Serious eye damage/eye irritation, Hazard Category 2A

USA

A2. N-Metilpirrol (NMePy)



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 31.07.2017

Versión 6.0

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número	820832
Denominación	1-Metilpirrol para síntesis

Número de registro REACH No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.

No. CAS 96-54-8

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados Producto químico para síntesis
Para informaciones adicionales a usos refiérase al portal Merck Chemicals (www.merckgroup.com; for USA/Canada www.emdgroup.com).

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0
Departamento Responsable LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)



Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, Oral, H302

Irritación cutánea, Categoría 2, H315

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302 Nocivo en caso de ingestión.

H315 Provoca irritación cutánea.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P302 + P352 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤ 125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

Contiene: 1-Methylpyrrole

No. CAS 96-54-8

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancia

Formula	C ₅ H ₇ N (Hill)
No. CE	202-513-7
Masa molar	81,12 g/mol

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

1-Methylpyrrole (≤ 100 %)

96-54-8 *)

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, H302

Irritación cutáneas, Categoría 2, H315

*) No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto por fecha posterior.

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.

Aclararse la piel con agua/ ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: cuidado con los vómitos. ¡Peligro de aspiración! Mantener libres las vías respiratorias. Posible obstrucción pulmonar tras aspiración del vómito. Llame inmediatamente al médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, Náusea, Tos, Insuficiencia respiratoria, Vértigo, Vómitos

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Espuma, Dióxido de carbono (CO₂), Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Prestar atención al retorno de la llama.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

El fuego puede provocar emanaciones de:

óxidos de nitrógeno, gases nitrosos

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Reprimir los gases/vapores/neblinas con agua pulverizada. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada.

Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con material absorbente de líquidos y neutralizante, p. ej. con Chemizorb® OH⁻ (art. Merck 101596). Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición.

Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel. Lavar cara y manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Protejido de la luz.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Fuera de los usos indicados en la sección 1.2 no se previenen aplicaciones finales adicionales.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos / la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumerción:

Material del guante:	goma butílica
Espesor del guante:	0,7 mm
tiempo de penetración:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,40 mm
tiempo de penetración:	> 10 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumerción), KCL 730 Camatril® -Velours (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma	líquido
Color	amarillo claro
Olor	aminado
Umbral olfativo	No hay información disponible.
pH	10,4 a 10 g/l 10 °C
Punto de fusión	-57 °C

Punto /intervalo de ebullición	111 - 113 °C a 1.013 hPa
Punto de inflamación	16 °C Método: c.c.
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	1,4 %(v)
Límite superior de explosividad	8,5 %(v)
Presión de vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa del vapor	2,8
Densidad	0,91 g/cm ³ a 20 °C
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	13 g/l a 20 °C
Coeficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: 1,21 (experimentalmente) (Literatura) No es de esperar una bioacumulación.
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.
Temperatura de descomposición	No hay información disponible.

Viscosidad, dinámica	0,7 mPa.s a 20 °C
Propiedades explosivas	No clasificado/a como explosivo/a.
Propiedades comburentes	ningún

9.2 Otros datos

Temperatura de ignición	400 °C Método: DIN 51794
-------------------------	-----------------------------

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

Sensibilidad a la luz

Sensible al aire.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacción exotérmica con:

ácidos

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

Agentes oxidantes fuertes, compuestos favorecedores de incendios

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

en caso de incendio: véase sección 5.

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 1.400 mg/kg

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Síntomas: Existe riesgo de aspiración al vomitar., Aspiración puede causar edema pulmonar y neumonía.

Toxicidad aguda por inhalación

CL50 Rata: > 5,6 mg/l; 4 h ; polvo/niebla

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Síntomas: Tos, Insuficiencia respiratoria, Su inhalación puede producir edemas en el tracto respiratorio.

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

Irritación de la piel

Conejo

Resultado: Irritaciones

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Provoca irritación cutánea.

Irritación ocular

Conejo

Resultado: No irrita los ojos

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Sensibilización

Esta información no está disponible.

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Resultado: negativo

(Literatura)

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad para la reproducción

Esta información no está disponible.

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Tras absorción:

Náusea, Vértigo, Vómitos

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

CL50 *Leuciscus idus* (Carpa dorada): 530 mg/l; 96 h

(Ficha de datos de Seguridad externa)

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

43 %; 28 d; aeróbico Demanda bioquímica de oxígeno
(Literatura)

12.3 Potencial de bioacumulación

Coeficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: 1,21
(experimentalmente)

(Literatura) No es de esperar una bioacumulación.

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Una valoración PBT y MPMB no se hizo, debido al echo de que una evaluac ión de peligro químico no es necesaria o no existe.

12.6 Otros efectos adversos

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 Número ONU	UN 1993
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	Líquido inflamable, n.e.p. (1-METHYLPYRROLE)
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	si
Código de restricciones en túneles	D/E

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

14.1 Número ONU	UN 1993
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	FLAMMABLE LIQUID, N.O.S. (1-METHYLPYRROLE)
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	no
Transporte marítimo (IMDG)	
14.1 Número ONU	UN 1993
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	FLAMMABLE LIQUID, N.O.S. (1-METHYLPYRROLE)
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	si
EmS	F-E S-E
14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC	No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

Legislación de Peligro de	SEVESO III
Accidente Importante	LÍQUIDOS INFLAMABLES
Alemania	P5c
	Cantidad 1: 5.000 t
	Cantidad 2: 50.000 t

Restricciones profesionales Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes. Obsérvense las restricciones considerando la protección maternal de acuerdo con la Directiva del Consejo 92/85/CEE o regulaciones más rigurosas nacionales.

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) n° 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1\%$ p/p) según la normativa CE n.º 1907/2006 (REACH), artículo 57.

Legislación nacional

Clase de almacenamiento 3

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

H225 Líquido y vapores muy inflamables.
H302 Nocivo en caso de ingestión.
H315 Provoca irritación cutánea.

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302 Nocivo en caso de ingestión.

H315 Provoca irritación cutánea.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P302 + P352 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

P313 Consultar a un médico.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Contiene: 1-Methylpyrrole

Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en www.wikipedia.org.

Representante regional

A3. Acetonitrilo (CH₃CN)

ficha de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) no 1907/2006 (REACH) modificado por 2015/830/UE



Acetonitrilo ROTISOLV® HPLC Gradient Grade

número de artículo: **8825**

Versión: **2.0 es**

Reemplaza la versión de: 20.10.2015

Versión: (1.0)

fecha de emisión: 20.10.2015

Revisión: 04.11.2016

SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Identificación de la sustancia	Acetonitrilo
Número de artículo	8825
Número de registro (REACH)	01-2119471307-38-xxxx
No de índice	608-001-00-3
Número CE	200-835-2
Número CAS	75-05-8

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados: producto químico de laboratorio

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Carl Roth GmbH + Co KG
Schoemperlenstr. 3-5
D-76185 Karlsruhe
Alemania

Teléfono: +49 (0) 721 - 56 06 0

Fax: +49 (0) 721 - 56 06 149

e-mail: sicherheit@carlroth.de

Sitio web: www.carlroth.de

Persona competente responsable de la ficha de datos de seguridad : Department Health, Safety and Environment

e-mail (persona competente) : sicherheit@carlroth.de

1.4 Teléfono de emergencia

Servicios de información para casos de emergencia **Poison Centre Munich: +49/(0)89 19240**

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

Clasificación según SGA			
Sección	Clase de peligro	Clase y categoría de peligro	Indicación de peligro
2.6	líquidos inflamables	(Flam. Liq. 2)	H225
3.10	toxicidad aguda (oral)	(Acute Tox. 4)	H302
3.10	toxicidad aguda (cutánea)	(Acute Tox. 4)	H312
3.11	toxicidad aguda (por inhalación)	(Acute Tox. 4)	H332
3.3	lesiones oculares graves o irritación ocular	(Eye Irrit. 2)	H319



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Observaciones

Véase el texto completo de las frases H y EUH en la SECCIÓN 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

Palabra de advertencia

Peligro

Pictogramas



Indicaciones de peligro

H225	Líquido y vapores muy inflamables.
H302+H312+H332	Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.
H319	Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Consejos de prudencia - prevención

P210	Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.
P280	Llevar guantes/prendas/gafas/máscara de protección.

Consejos de prudencia - respuesta

P305+P351+P338	EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.
----------------	--

Consejos de prudencia - almacenamiento

P403+P235	Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener en lugar fresco.
-----------	---

Etiquetado de los envases cuyo contenido no excede de 125 ml

Palabra de advertencia: Peligro

Símbolo(s)



2.3 Otros peligros

No hay información adicional.

SECCIÓN 3: Composición/Información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Nombre de la sustancia	Acetonitrilo
No de índice	608-001-00-3
Número de registro (REACH)	01-2119471307-38-xxxx
Número CE	200-835-2
Número CAS	75-05-8
Fórmula molecular	C_2H_3N
Masa molar	41,05 g/mol

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios



Notas generales

Quitar las prendas contaminadas.

En caso de inhalación

Proporcionar aire fresco. Si aparece malestar o en caso de duda consultar a un médico.

En caso de contacto con la piel

Aclararse la piel con agua/ducharse. Si aparece malestar o en caso de duda consultar a un médico.

En caso de contacto con los ojos

Mantener separados los párpados y enjuagar con abundante agua limpia y fresca por lo menos durante 10 minutos. En caso de irritación ocular consultar al oculista.

En caso de ingestión

Enjuáguese la boca con agua (solamente si la persona está consciente). Llamar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Pérdida de conciencia, Cefalea, Vómitos, Vértigo, Náuseas, Irritación, Espasmos, Ahogos

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Los síntomas pueden aparecer varias horas después de la exposición; por ello es necesaria la observación médica al menos 48 horas después de la exposición.

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Coordinar las medidas de extinción con los alrededores
agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono (CO₂)

Medios de extinción no apropiados

chorro de agua

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Combustible. Vapores pesan más que aire, se extienden sobre el suelo y producen con aire mezclas explosivas.

Productos de combustión peligrosos

En caso de incendio pueden formarse: óxidos de nitrógeno (NO_x), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), ácido cianhídrico (HCN, ácido prúsico)

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Luchar contra el incendio desde una distancia razonable, tomando las precauciones habituales. Llevar un aparato de respiración autónomo.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia

La utilización de equipos de protección adecuados (incluido el equipo de protección personal mencionado en la sección 8 de la ficha de datos de seguridad) con el fin de evitar toda posible contaminación de la piel, los ojos y la ropa. Evitar el contacto con la piel, los ojos y la ropa. No respirar los vapores/aerosoles. Prevención de las fuentes de ignición.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

Manteniendo el producto alejado de los desagües y de las aguas superficiales y subterráneas. Propiedades explosivas.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Consejos sobre la manera de contener un vertido

Cierre de desagües.

Indicaciones adecuadas sobre la manera de limpiar un vertido

Absorber con una sustancia aglutinante de líquidos (arena, harina fósil, aglutinante de ácidos, aglutinante universal).

Otras indicaciones relativas a los vertidos y las fugas

Colocar en recipientes apropiadas para su eliminación. Ventilar la zona afectada.

Referencia a otras secciones

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5. Equipo de protección personal: véase sección 8. Materiales incompatibles: véase sección 10. Consideraciones relativas a la eliminación: véase sección 13.

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Prever una ventilación suficiente.

• **Medidas de prevención de incendios, así como las destinadas a impedir la formación de partículas en suspensión y polvo**



Conservar alejado de toda llama o fuente de chispas - No fumar.

Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas. Debido al peligro de explosión, evitar

perdidas de vapores en bodegas, alcantarillados y cunetas.

Recomendaciones sobre medidas generales de higiene en el trabajo

Lavar las manos antes de las pausas y al fin del trabajo. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. No fumar durante su utilización.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Sustancias o mezclas incompatibles

Observe el almacenamiento compatible de productos químicos.

Atención a otras indicaciones

Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

• **Requisitos de ventilación**

Utilización de ventilación local y general.

• **Diseño específico de locales o depósitos de almacenamiento**

Temperatura de almacenaje recomendada: 15 - 25 °C.

7.3 Usos específicos finales

No existen informaciones.

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Valores límites nacionales

Valores límites de exposición profesional (límites de exposición en el lugar de trabajo)

País	Nombre del agente	No CAS	Identificador	VLA-ED [ppm]	VLA-ED [mg/m³]	VLA-EC [mg/m³]	Fuente
ES	acetonitrilo	75-05-8	VLA	40	68		INSHT
EU	acetonitrilo	75-05-8	IOELV	40	70		2006/15/CE

Anotación

VLA-EC Valor límite ambiental-exposición de corta duración (nivel de exposición de corta duración): valor límite a partir del cual no debe producirse ninguna exposición y que hace referencia a un período de 15 minutos, salvo que se disponga lo contrario

VLA-ED Valor límite ambiental-exposición diaria (límite de exposición de larga duración): tiempo medido o calculado en relación con un período de referencia de una media ponderada en el tiempo de ocho horas

DNEL/DMEL/PNEC pertinentes y otros niveles umbrales

• valores relativos a la salud humana

Parámetro	Niveles umbrales	Objetivo de protección, vía de exposición	Utilizado en	Tiempo de exposición
DNEL	68 mg/m³	humana, por inhalación	trabajador (industria)	agudo - efectos locales
DNEL	68 mg/m³	humana, por inhalación	trabajador (industria)	agudo - efectos sistémicos
DNEL	68 mg/m³	humana, por inhalación	trabajador (industria)	crónico - efectos locales
DNEL	32,2 mg/kg	humana, cutánea	trabajador (industria)	crónico - efectos sistémicos
DNEL	68 mg/m³	humana, por inhalación	trabajador (industria)	crónico - efectos sistémicos

• valores medioambientales

Parámetro	Niveles umbrales	Compartimento ambiental	Tiempo de exposición
PNEC	10 mg/l	agua dulce	corto plazo (ocasión única)
PNEC	1 mg/l	agua marina	corto plazo (ocasión única)
PNEC	32 mg/l	depuradora de aguas residuales (STP)	corto plazo (ocasión única)
PNEC	7,53 mg/kg	sedimentos de agua dulce	corto plazo (ocasión única)
PNEC	2,41 mg/kg	suelo	corto plazo (ocasión única)
PNEC	10 mg/l	agua	emisiones intermitentes

8.2 Controles de exposición

Medidas de protección individual (equipo de protección personal)



Protección de los ojos/la cara

Utilizar gafas de protección con protección a los costados.

Protección de la piel

• protección de las manos

Úsen se guantes adecuados. Adecuado es un guante de protección química probado según la norma EN 374. Para usos especiales se recomienda verificar con el proveedor de los guantes de protección, sobre la resistencia de éstos contra los productos químicos arriba mencionados.

• tipo de material

Caucho de butilo

- **espesor del material**

0,7mm.

- **tiempo de penetración del material con el que están fabricados los guantes**

>480 minutos (permeación: nivel 6)

- **otras medidas de protección**

Hacer períodos de recuperación para la regeneración de la piel. Están recomendados los protectores de piel preventivos (cremas de protección/pomadas).

Ropa protectora de fuego.

Protección respiratoria

Protección respiratoria es necesaria para: Formación de aerosol y niebla. Tipo: A (contra gases y vapores orgánicos con un punto de ebullición de > 65°C, código de color: marrón).

Controles de exposición medioambiental

Manteniendo el producto alejado de los desagües y de las aguas superficiales y subterráneas.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Aspecto

Estado físico	líquido (fluido)
Color	incolor
Olor	esta información no está disponible
Umbral olfativo	No existen datos disponibles

Otros parámetros físicos y químicos

pH (valor)	Esta información no está disponible.
Punto de fusión/punto de congelación	-45,7 °C
Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	81,6 °C a 1.013 hPa
Punto de inflamación	6 °C (vaso abierto)
Tasa de evaporación	no existen datos disponibles
Inflamabilidad (sólido, gas)	no relevantes (fluido)

Límites de explosividad

• límite inferior de explosividad (LIE)	4,4 % vol (50 g/m³)
• límite superior de explosividad (LSE)	16 % vol (274 g/m³)
Límites de explosividad de nubes de polvo	no relevantes
Presión de vapor	94,51 hPa a 20 °C 118,4 hPa a 25 °C
Densidad	0,782 g/cm³ a 20 °C
Densidad de vapor	1,42 (aire = 1)
Densidad aparente	No es aplicable
Densidad relativa	Las informaciones sobre esta propiedad no están disponibles.

<u>Solubilidad(es)</u>	
Hidrosolubilidad	1.000 g/l a 25 °C
<u>Coefficiente de reparto</u>	
n-octanol/agua (log KOW)	-0,34
Carbono orgánico en el suelo/agua (log KOC)	0,654 (ECHA)
Temperatura de auto-inflamación	524 °C - ECHA
Temperatura de descomposición	no existen datos disponibles
<u>Viscosidad</u>	
• viscosidad dinámica	0,39 mPa s a 20 °C
Propiedades explosivas	No se clasificará como explosiva
Propiedades comburentes	ninguno
9.2 Otros datos	
Índice de refracción	1,344
Clase de temperatura (UE según ATEX)	T1 (Temperatura de superficie máxima admisible en el equipo: 450°C)

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

riesgo de ignición. Vapores pueden formar con aire una mezcla explosiva.

10.2 Estabilidad química

El material es estable bajo condiciones ambientales normales y en condiciones previsibles de temperatura y presión durante su almacenamiento y manipulación.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacciones fuertes con: Comburentes, Ácidos, Ácido nítrico, Percloratos

10.4 Condiciones que deben evitarse

Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

10.5 Materiales incompatibles

No hay información adicional.

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5.

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda

Vía de exposición	Parámetro	Valor	Especie	Fuente
oral	LD50	2.460 mg/kg	rata	GESTIS
cutánea	LD50	>2.000 mg/kg	conejo	ECHA

Corrosión o irritación cutánea

No se clasificará como corrosivo/irritante para la piel.

Lesiones oculares graves o irritación ocular

Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización respiratoria o cutánea

No se clasificará como sensibilizante respiratoria o sensibilizante cutánea.

Resumen de la evaluación de las propiedades CMR

No se clasificará como mutágeno en células germinales, carcinógeno ni tóxico para la reproducción

• Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición única).

• Toxicidad específica en determinados órganos - exposición repetida

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición repetida).

Peligro por aspiración

No se clasifica como peligroso en caso de aspiración.

Síntomas relacionados con las características físicas, químicas y toxicológicas

• En caso de ingestión

vómitos, náuseas, Espasmos

• En caso de contacto con los ojos

Provoca irritación ocular grave

• En caso de inhalación

vértigo, cefalea

• En caso de contacto con la piel

riesgo de penetración cutánea

Otros datos

Dolor abdominal. Edema pulmonar.

12.1 Toxicidad

según 1272/2008/CE: No se clasificará como peligroso para el medio ambiente acuático.

Toxicidad acuática (aguda)

Parámetro	Valor	Especie	Fuente	Tiempo de exposición
LC50	1.640 mg/l	Pimephales promelas	IUCLID	96 h
EC50	3.560 mg/l	alga	ECHA	72 h
ErC50	9.696 mg/l	alga	ECHA	72 h

Toxicidad acuática (crónica)

Parámetro	Valor	Especie	Fuente	Tiempo de exposición
LC50	>102 mg/l	pez	ECHA	7 d
LOEC	>102 mg/l	pez	ECHA	21 d
NOEC	102 mg/l	pez	ECHA	21 d

12.2 Procesos de degradación

La sustancia es fácilmente biodegradable.

Demanda Teórica de Oxígeno con nitrificación: 3,118 mg/mg

Demanda Teórica de Oxígeno: 1,559 mg/mg

Dióxido de Carbono Teórico: 2,144 mg/mg

Proceso	Velocidad de degradación	Tiempo
biótico/abiótico	98 %	28 d
generación de dióxido de carbono	70 %	21 d

12.3 Potencial de bioacumulación

Se enriquece en organismos insignificadamente.

n-octanol/agua (log KOW) -0,34

12.4 Movilidad en el suelo

Constante de la ley de Henry 3,5 $\text{Pa m}^3/\text{mol}$ a 20 °C

El coeficiente de adsorción normalizado para tener en cuenta el carbono orgánico 0,654

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

No se dispone de datos.

12.6 Otros efectos adversos

No se dispone de datos.

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1 Métodos para el tratamiento de residuos

Elimínense el producto y su recipiente como residuos peligrosos. Eliminar el contenido/el recipiente de conformidad con la normativa local, regional, nacional o internacional.

Información pertinente para el tratamiento de las aguas residuales

No tirar los residuos por el desagüe.

Tratamiento de residuos de recipientes/embalajes

Es un residuo peligroso; solamente pueden usarse envases que han sido aprobado (p.ej. conforme a ADR).

13.2 Disposiciones sobre prevención de residuos

La coordinación de los números de clave de los residuos/marcas de residuos según CER hay que efectuarla específicamente de ramo y proceso.

13.3 Observaciones

Los residuos se deben clasificar en las categorías aceptadas por los centros locales o nacionales de tratamiento de residuos. Por favor considerar las disposiciones nacionales o regionales pertinentes.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

14.1	Número ONU	1648
14.2	Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	ACETONITRILLO
	Componentes peligrosos	Acetonitrilo
14.3	Clase(s) de peligro para el transporte	
	Clase	3 (líquidos inflamables)
14.4	Grupo de embalaje	II (materia medianamente peligrosa)
14.5	Peligros para el medio ambiente	ninguno (no peligroso para el medio ambiente conforme al reglamento para el transporte de mercancías peligrosas)
14.6	Precauciones particulares para los usuarios	
	Las disposiciones concernientes a las mercancías peligrosas (ADR) se deben cumplir dentro de las instalaciones.	
14.7	Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio MARPOL y del Código IBC	
	El transporte a granel de la mercancía no está previsto.	
14.8	Información para cada uno de los Reglamentos tipo de las Naciones Unidas	
	• Transporte de mercancías peligrosas por carretera, por ferrocarril o por vía navegable (ADR/RID/ADN)	
	Número ONU	1648
	Designación oficial	ACETONITRILLO
	Menciones en la carta de porte	UN1648, ACETONITRILLO, 3, II, (D/E)
	Clase	3
	Código de clasificación	F1
	Grupo de embalaje	II
	Etiqueta(s) de peligro	3



Cantidades exemptuadas (EQ)	E2
Cantidades limitadas (LQ)	1 L
Categoría de transporte (CT)	2
Código de restricciones en túneles (CRT)	D/E
Número de identificación de peligro	33
• Código marítimo internacional de mercancías peligrosas (IMDG)	
Número ONU	1648
Designación oficial	ACETONITRILE
Designaciones indicadas en la declaración del expedidor (shipper's declaration)	UN1648, ACETONITRILE, 3, II, 6°C c.c.
Clase	3
Grupo de embalaje	II
Etiqueta(s) de peligro	3



Disposiciones especiales (DS)	-
Cantidades exemptuadas (EQ)	E2
Cantidades limitadas (LQ)	1 l
EmS	F-E, S-D
Categoría de estiba (stowage category)	B

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones pertinentes de la Unión Europea (UE)

• Reglamento 649/2012/UE relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos (PIC)

No incluido en la lista.

• Reglamento 1005/2009/CE sobre las sustancias que agotan la capa de ozono (SAO)

No incluido en la lista.

• **Reglamento 850/2004/CE sobre contaminantes orgánicos persistentes (POP)**

No incluido en la lista.

• **Restricciones conforme a REACH, Anexo XVII**

no incluido en la lista

• **Lista de sustancias sujetas a autorización (REACH, Anexo XIV)**

no incluido en la lista

• **Directiva Seveso**

2012/18/UE (Seveso III)			
No	Sustancia peligrosa/categorías de peligro	Cantidades umbral (en toneladas) de aplicación de los requisitos de nivel inferior e superior	Notas
P5c	líquidos inflamables (cat. 2, 3)	5.000 50.000	51)

Anotación

51) Líquidos inflamables de las categorías 2 o 3 no comprendidos en P5a y P5b

• **Limitación de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles debidas al uso de disolventes orgánicos en determinadas pinturas y barnices y en los productos de renovación del acabado de vehículo (2004/42/CE, Directiva Decopaint)**

Contenido de COV 100 %

• **Directiva sobre emisiones industriales (COVs, 2010/75/UE)**

Contenido de COV 100 %

Directiva 2011/65/UE sobre restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas en aparatos eléctricos y electrónicos (RoHS) - Anexo II

no incluido en la lista

Reglamento 166/2006/CE relativo al establecimiento de un registro europeo de emisiones y transferencias de contaminantes (PRTR)

no incluido en la lista

Directiva 2000/60/CE por la que se establece un marco comunitario de actuación en el ámbito de la política de aguas

no incluido en la lista

Catálogos nacionales

La sustancia es enumerada en los siguientes inventarios nacionales:

- EINECS/ELINCS/NLP (Europa)
- REACH (Europa)

15.2 Evaluación de la seguridad química

No se ha realizado una evaluación de la seguridad química de esta sustancia.

16.1 Indicación de modificaciones (ficha de datos de seguridad revisada)

Sección	Inscripción anterior (texto/valor)	Inscripción actual (texto/valor)
2.2		Pictogramas: modificación en el listado (tabla)
2.2		Etiquetado de los envases cuyo contenido no excede de 125 ml: modificación en el listado (tabla)
4.1	En caso de contacto con la piel: Aclararse la piel con agua/ducharse. En caso de irritaciones cutáneas, consultar a un dermatólogo.	En caso de contacto con la piel: Aclararse la piel con agua/ducharse. Si aparece malestar o en caso de duda consultar a un médico.
8.2	Protección respiratoria: Protección respiratoria es necesaria para: Formación de aerosol y niebla. Tipo: A (contra gases y vapores orgánicos con un punto de ebullición de $> 65^{\circ}\text{C}$, código de color: marrón). El tiempo límite de uso según GefStoffV en combinación con las reglas sobre el uso de aparatos respiratorios (BGR 190) se deben respetar.	Protección respiratoria: Protección respiratoria es necesaria para: Formación de aerosol y niebla. Tipo: A (contra gases y vapores orgánicos con un punto de ebullición de $> 65^{\circ}\text{C}$, código de color: marrón).
9.1	Punto de inflamación: 6°C	Punto de inflamación: 6°C (vaso abierto)
9.1	Presión de vapor: 118,4 hPa a 25°C	Presión de vapor: 94,51 hPa a 20°C 118,4 hPa a 25°C
9.1	Propiedades explosivas: ninguno	Propiedades explosivas: No se clasificará como explosiva
9.2		Clase de temperatura (UE según ATEQ: T1 (Temperatura de superficie máxima admisible en el equipo: 450°C)
12.6	Otros efectos adversos: Peligroso para el agua.	Otros efectos adversos: No se dispone de datos.

Abreviaturas y los acrónimos

Abrev.	Descripciones de las abreviaturas utilizadas
2006/15/CE	Directiva de la Comisión por la que se establece una segunda lista de valores límite de exposición profesional indicativos en aplicación de la Directiva 98/24/CE del Consejo y por la que se modifican las Directivas 91/322/CEE y 2000/39/CE
ADN	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par voies de navigation intérieures (Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Vías Navegables Interiores)
ADR	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par route (Acuerdo europeo relativo al transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera)
CAS	Chemical Abstracts Service (número identificador único carente de significado químico)
CLP	Reglamento (CE) no 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado (Classification, Labelling and Packaging) de sustancias y mezclas
CMR	Cardinógeno, Mutágeno o tóxico para la Reproducción
COV	compuestos orgánicos volátiles
DMEL	Derived Minimal Effect Level (nivel derivado con efecto mínimo)
DNEL	Derived No-Effect Level (nivel sin efecto derivado)
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (Catálogo Europeo de Sustancias Químicas Comercializadas)
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances (lista europea de sustancias químicas notificadas)

Abrev.	Descripciones de las abreviaturas utilizadas
EmS	Emergency Schedule (programa de emergencias)
IMDG	International Maritime Dangerous Goods Code (código marítimo internacional de mercancías peligrosas)
INSHT	Límites de Exposición Profesional para Agentes Químicos, INSHT
IOELV	valor límite de exposición profesional indicativo
MARPOL	el convenio internacional para prevenir la contaminación por los buques (abr. de "Marine Pollutant")
mPmB	muy persistente y muy bioacumulable
NLP	No-Longer Polymer (ex-polímero)
No de índice	el número de clasificación es el código de identificación que se da a la sustancia en la parte 3 del el anexo VI del Reglamento (CE) no 1272/2008
PBT	Persistente, Bioacumulable y Tóxico
PNEC	Predicted No-Effect Concentration (concentración prevista sin efecto)
ppm	partes por millón
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (registro, evaluación, autorización y restricción de las sustancias y preparados químicos ⁹)
RID	Règlement concernant le transport International ferroviaire des marchandises Dangereuses (Reglamento referente al transporte internacional por ferrocarril de mercancías peligrosas)
SGA	"Sistema Globalmente Armonizado de clasificación y etiquetado de sustancias químicas" elaborado por Naciones Unidas
VLA	valor límite ambiental
VLA-EC	valor límite ambiental-exposición de corta duración
VLA-ED	valor límite ambiental-exposición diaria

Principales referencias bibliográficas y fuentes de datos

- Reglamento (CE) no 1907/2006 (REACH), modificado por 2015/830/UE
- Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP, UE SGA)

Frases pertinentes (código y texto completo como se expone en el capítulo 2 y 3)

Código	Texto
H225	líquido y vapores muy inflamables
H302	nocivo en caso de ingestión
H312	nocivo en contacto con la piel
H319	provoca irritación ocular grave
H332	nocivo en caso de inhalación

Cláusula de exención de responsabilidad

La información en ésta hoja de datos de seguridad corresponden al leal saber de nuestros conocimiento el día de impresión. Las informaciones deben de ser puntos de apoyo para un manejo seguro de productos mencionados en esta hoja de seguridad para el almacenamiento, elaboración, transporte y eliminación. Las indicaciones no se pueden traspasar a otros productos. Mientras el producto sea mezclado o elaborado con otros materiales, las indicaciones de esta hoja de seguridad no se pueden traspasar así al agente nuevo.

A4. Perclorato de litio (LiClO₄)



Ficha de datos de seguridad
según 1907/2006/CE, Artículo 31

página: 1/5
fecha de impresión: 10.11.2015
Revisión: 15.04.2014

1 Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa Identificador del producto Nombre comercial: <u>Perclorato de litio</u> Número del artículo: A10050 Número CAS: 7791-03-9 Número CE: 232-237-2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados. Uso identificado: SU24 Investigación y desarrollo científicos Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad Fabricante/distribuidor: Alfa Aesar Thermo Fisher Scientific Chemicals, Inc. 30 Bond Street Ward Hill, MA 01835-8099 Tel: 800-343-0000 Fax: 800-322-4757 Email: tech@alfa.com www.alfa.com Área de información: Departamento de seguridad del producto Teléfono de emergencia: Durante el horario normal (de lunes a viernes de 8 am a 7 pm, hora), llame al (800) 343 a 0000. Después de horas de oficina, llame Carechem 24 al (800) 928-0780.	
2 Identificación de los peligros Clasificación de la sustancia o de la mezcla <div> GHS03 llama sobre un círculo </div> <div> GHS07 </div> <div> H315 Provoca irritación cutánea. H319 Provoca irritación ocular grave. H335 Puede irritar las vías respiratorias. STOT única 3 </div> Clasificación con arreglo a la Directiva 67/548/CEE o Directiva 1999/45/CE <div> Xn; Irritante R36/37/38: Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias. </div> <div> O; Comburente R8: Peligro de fuego en contacto con materias combustibles. Indicaciones adicionales sobre los riesgos para personas y el medio ambiente: Nulo Otros peligros que no conducen a una clasificación No se dispone de información. </div> Elementos de la etiqueta Distintivo según las directrices de la CEE: Letra indicadora y denominación de la peligrosidad del producto: <div> Xi Irritante O Comburente </div> Frases-R: R8: Peligro de fuego en contacto con materias combustibles. R36/37/38 Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias. Frases-S: S26: En caso de contacto con los ojos, lávese inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. S37: Utilice guantes adecuados. S60: Elimínese el producto y su recipiente como residuos peligrosos. Sistema de clasificación: Valoración HMIS (escala 0-4) (Sistema de identificación de materiales peligrosos) <div> Salud (efectos agudos) = 1 Inflamabilidad = 0 Peligro Físico = 3 </div> Otros peligros Resultados de la valoración PBT y mPMB PBT: No aplicable. mPMB: No aplicable.	
3 Composición/información sobre los componentes Caracterización química: Sustancias Nº CAS Denominación 7791-03-9 Perclorato de litio Número(s) de identificación Número CE: 232-237-2	

(se continua en página 2)



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

4 Primeros auxilios**Descripción de los primeros auxilios**

En caso de inhalación del producto: Suministrar aire fresco; eventualmente hacer respiración artificial, calor. Si los trastornos persisten, consultar al médico.

Consultar inmediatamente al médico

En caso de contacto con la piel:

Lavar en seguida con agua y jabón, enjuagando bien.

Consultar inmediatamente al médico

En caso de con los ojos: Enjuagar durante varios minutos los ojos entornados con agua corriente y consultar al médico.

En caso de ingestión: Mandar al médico

Avisos para el médico:

Principales síntomas y efectos, agudos y retardados: No existen más datos relevantes disponibles.

Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente: No existen más datos relevantes disponibles.

5 Medidas de lucha contra incendios**Medios de extinción**

Sustancias extintoras adecuadas:

CO₂, polvo de extinción o chorro de agua chispeante. Combatir incendios mayores con chorro de agua chispeante o espuma resistente al alcohol.

Sustancias extintoras inadecuadas por razones de seguridad: Extintor de hidrocarburos halogenados

Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Esta sustancia es un oxidante y su calor de reacción con agentes reductores o combustibles puede causar una ignición

Si este producto está involucrado en un incendio, el siguiente puede ser liberado:

Cloruro de hidrógeno (HCl)

Oxido de litio

Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo especial de protección:

Llevar puesto aparato de protección de respiración Independientemente del aire ambiental

Llevar puesto traje de protección completa

6 Medidas en caso de vertido accidental

Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Llevar puesto equipo de protección. Mantener alejadas las personas sin protección.

Asegurarse de que haya suficiente ventilación.

Precauciones relativas al medio ambiente: No dejar introducirse al alcantarillado o las aguas.

Métodos y material de contención y de limpieza: Asegurar ventilación suficiente.

Prevención de riesgos secundarios:

Ataca como medio de oxidación, materias orgánicas tales como madera, papel, grasa.

Manténgase lejos de materias combustibles.

Referencia a otras secciones

Las informaciones para una manipulación segura, véase capítulo 13.

Ver capítulo 8 para mayor información sobre el equipo personal de protección.

Para mayor información sobre cómo desechar el producto, ver capítulo 13.

7 Manipulación y almacenamiento**Manejo:**

Precauciones para una manipulación segura

Manipular bajo gas protector seco

Mantener el depósito cerrado de forma estanca

Almacenar, en envases bien cerrados, en un ambiente seco y fresco.

Asegurar suficiente ventilación/aspiración en el puesto de trabajo.

Prevención de incendios y explosiones:

El material/producto puede reducir la temperatura de inflamación de sustancias inflamables

Esta sustancia es un oxidante y su calor de reacción con agentes reductores o combustibles puede causar una ignición

Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Almacenaje:

Exigencias con respecto al almacén y los recipientes: No requiere medidas especiales.

Normas en caso de un almacenamiento conjunto:

No almacenar junto con materiales inflamables.

No almacenar junto con agentes reductores.

No almacenar con materiales orgánicos.

No almacenar junto con polvos metálicos

No almacenar junto con agua

Indicaciones adicionales sobre las condiciones de almacenamiento:

Almacenarlo bajo gas inerte seco.

El producto es higroscópico.

Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Almacenarlo en envases bien cerrados en un lugar fresco y seco.

Proteger de la humedad y del agua.

Usos específicos finales: No existen más datos relevantes disponibles.

8 Controles de exposición/protección individual

Instrucciones adicionales sobre el acondicionamiento de instalaciones técnicas:

Campana extractora para humos químicos de funcionamiento correcto diseñada para productos químicos peligrosos y con una velocidad de extracción de al menos 30 metros por minuto.

Parámetros de control

Componentes con valores límite admisibles que deben controlarse en el puesto de trabajo:

El producto no contiene cantidades relevantes de sustancias con valores límite que exijan un control en el puesto de trabajo.

Instrucciones adicionales: Sin datos

Controles de la exposición

Equipo de protección personal

Medidas generales de protección e higiene

Son de respetar las medidas regulares de seguridad para el manejo de productos químicos.

Mantener alejado de alimentos, bebidas y forraje.

Quitarse inmediatamente ropa ensuciada o impregnada.

Lavarse las manos antes de las pausas y al final del trabajo.

Evitar el contacto con los ojos y con la piel.

Mantener un entorno ergonómico adecuado de trabajo.

Protección de respiración: Si las concentraciones son elevadas, llevar protección respiratoria.

(se continua en página 3)

SA

Nombre comercial: Perclorato de litio

(se continúa en página 5)

Aparato de filtro recomendado para aplicación de corta duración.
 Use um respirador N95 com o tipo (EUA) ou (EN 143) PE cartões como um backup para os controles de engenharia. Avaliação de risco deve ser realizada para determinar se respiradores purificadores de ar são adequados. Só use equipamentos testados e aprovados segundo as normas governamentais apropriadas.

Protección de manos:
 Antes de cada uso, comprobar el estado de los guantes de seguridad.
 La elección del guante adecuado no depende únicamente del material, sino también de otras características de calidad, que pueden variar de un fabricante a otro

Material de los guantes: Caucho nitrílico
Tiempo de penetración del material de los guantes (en minutos): Sin determinar

Protección de ojos:
 Gafas de protección.
 Protección facial

Protección de cuerpo: Ropa de trabajo protectora

9 Propiedades físicas y químicas**Información sobre propiedades físicas y químicas básicas****Datos generales****Aspecto:****Forma:**

Various forms (powder/flake/crystalline/beads, etc.)

Color:

Bianco

Olor:

Indeterminado

Umbral olfativo:

No determinado.

valor pH:

No aplicable.

Modificación de estado**Punto de fusión /campo de fusión:**

236 °C

Punto de ebullición /campo de ebullición:

400 °C (dec)

Temperatura de sublimación/ inicio de la sublimación:

Sin determinar

Inflamabilidad (sólido, gasoliforme):

Peligro de fuego en contacto con materias combustibles.

Temperatura fulminante:

Sin determinar

Temperatura de descomposición:

Sin determinar

Autoinflamabilidad:

No determinado.

Peligro de explosión:

No determinado.

Límites de explosión:**Inferior:**

Sin determinar

Superior:

Sin determinar

Presión de vapor:

No aplicable.

Densidad a 20 °C:2,43 g/cm³**Densidad relativa:**

No determinado.

Densidad de vapor:

No aplicable.

Velocidad de evaporación:

No aplicable.

Solubilidad en / mezclabilidad con**Agua:**

Soluble

Coefficiente de distribución (n-Octano/agua):

No determinado.

Viscosidad**Dinámica:**

No aplicable.

Cinemática:

No aplicable.

Información adicional

No existen más datos relevantes disponibles.

10 Estabilidad y reactividad**Reactividad:** Puede agravar un incendio; comburente.**Estabilidad química:** Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.**Descomposición térmica / condiciones que deben evitarse:** No se descompone con almacenaje y manejo adecuado.**Possibilidad de reacciones peligrosas:****Reacciones con medios de reducción:****Reacciones con materiales inflamables:****Condiciones que deben evitarse:** No existen más datos relevantes disponibles.**Materiales incompatibles:****Flammable substances:****Agentes reductores:****Agua / humedad:****Materiales orgánicos:****Pólvos metálicos:****Productos de descomposición peligrosos:****Ácido clorhídrico (HCl)****Lithium oxide****11 Información toxicológica****Información sobre los efectos toxicológicos****Toxicidad aguda:** No hay efectos conocidos.**Valores LD/LC50 (dosis letal /dosis letal = 50%) relevantes para la clasificación:** Sin datos**Irritación o corrosión:** Provoca irritación cutánea.**Irritación de los ojos o la corrosión:** Provoca irritación ocular grave.**Sensibilización:** No se conoce ningún efecto sensibilizador**Mutagenicidad en células germinales:** No hay efectos conocidos.**Carcinogenicidad:** No hay datos clasificatorios sobre las propiedades carcinógenas de este material de la EPA, IARC, NTP, OSHA o ACGIH.**Toxicidad para la reproducción:** No hay efectos conocidos.**Específica en determinados órganos del sistema toxicidad - La exposición repetida:** No hay efectos conocidos.**Específica en determinados órganos del sistema toxicidad - exposición única:** Puede irritar las vías respiratorias.**Peligro por aspiración:** No hay efectos conocidos.**Toxicidad de subaguda a crónica:** No hay efectos conocidos.**Instrucciones adicionales toxicológicas:** Que nosotros sepamos no se conoce totalmente la toxicidad aguda y crónica de esta sustancia.**12 Información ecológica****Toxicidad****Toxicidad acuática:** No existen más datos relevantes disponibles.**Persistencia y degradabilidad:** No existen más datos relevantes disponibles.**Potencial de bioacumulación:** No existen más datos relevantes disponibles.**Movilidad en el suelo:** No existen más datos relevantes disponibles.

(se continúa en página 5)



Indicaciones medioambientales adicionales:

Instrucciones generales:

Nivel de riesgo para el agua 1 (autoclasiificación): escasamente peligroso para el agua
En estado no diluido o no neutralizado, no dejar que se infiltre en aguas subterráneas, aguas superficiales o en alcantarillados.
Es necesario evitar un contacto con el medio ambiente.

Resultados de la valoración PBT y mPMB

PBT: No aplicable.

mPMB: No aplicable.

Otros efectos adversos No existen más datos relevantes disponibles.

13 Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Recomendación:

Entregar a colectores de basura especial o llevar a un depósito de sustancias problemáticas.

Debe ser sometido a un tratamiento especial conforme a las normativas oficiales.


Consulte la normativa autonómica, local o nacional para una eliminación apropiada como desecho.

Embalajes no purificados:

Recomendación: Eliminación conforme a las disposiciones administrativas.

Producto de limpieza recomendado: Agua, eventualmente añadiendo productos de limpieza.

14 Información relativa al transporte

Número UN IMDG, IATA	UN1481
Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas IMDG, IATA	PERCHLORATES, INORGANIC, N.O.S. (Lithium perchlorate anhydrous)
Clase(s) de peligro para el transporte	5.1 (O2) Materias comburentes
Clase	5.1
Etiqueta	5.1
IMDG, IATA	
	
Class	5.1 Oxidising substances.
Label	5.1
Grupo de embalaje IMDG, IATA	II
Peligros para el medio ambiente:	No aplicable.
Precauciones particulares para los usuarios	Atención: Materias comburentes
Número EMS:	F+H, S-Q
Segregation groups	Perchlorates
Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC	No aplicable.
Transporte/datos adicionales:	E2
Cantidades exceptuadas (EQ):	1 kg
Cantidades limitadas (LQ):	2
Categoría de transporte	E
Código de restricción del túnel	
Reglamentación Modelo de la UNECE:	UN1481, PERCLORATOS INORGÁNICOS, N.E.P. (Perclorato de litio), 5.1, II

15 Información reglamentaria

Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Distinción según las directrices de la CEE:

Letra distintiva y denominación de peligro del producto:



Xi Irritante
O Comburente

Frases-R:

8 Peligro de fuego en contacto con materias combustibles.

36/37/38 Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.

Frases-S:

17 Manténgase lejos de materias combustibles.

26 En caso de contacto con los ojos, lávese inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico.

37 Use guantes adecuados.

60 Elimínese el producto y su recipiente como residuos peligrosos.

Reglamento nacional:

Indicaciones sobre las limitaciones de trabajo:

Tener en cuenta las limitaciones de empleo para los jóvenes.

Uso restringido a personas técnicamente cualificadas.

Clase de peligro para el agua: CPA 1 (autoclasiificación): poco peligroso para el agua.

Demás disposiciones, limitaciones y decretos prohibitivos

Sustancias altamente preocupantes (SVHC) según REACH (CE) N° 1907/2006. La sustancia no está en la lista.

Evaluación de la seguridad química: Una evaluación de la seguridad química no se ha llevado a cabo.

16 Otra información

Los empresarios deben usar esta información sólo como complemento a otras informaciones que puedan reunir y deben enjuiciarla de forma independiente la aptitud de esta información para asegurar un uso adecuado y proteger la salud y seguridad de sus empleados. Esta información se suministra sin ninguna garantía y cualquier uso del producto que no esté conforme con la hoja de datos de seguridad del material o en combinación con cualquier otro producto o procesos es responsabilidad del usuario.

Sector que expide la hoja de datos de seguridad: Departamento de Marketing Global

Abreviaturas y acrónimos:

ADR: Accord européen sur le transport des marchandises dangereuses par Route (Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Carretera)

(se continua en página 6)

IMDG: Código Marítimo Internacional de Mercancías Peligrosas
IATA: International Air Transport Association
EINECS: European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances
CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)
HMIS: Hazardous Materials Identification System (USA)
LC50: Lethal concentration, 50 percent
DL50: dosis letal, 50 por ciento
vPvB: very Persistent and very Bioaccumulative
ACGIH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists (USA)
OSHA: Occupational Safety and Health Administration (USA)
NTP: National Toxicology Program (USA)
IARC: International Agency for Research on Cancer
EPA: Environmental Protection Agency (USA)



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

A5. Cloruro de sodio (NaCl)

Ficha de datos de seguridad

conforme al Reglamento (CE) no 1907/2006 (REACH) modificado por 2015/830/UE



Cloruro de sodio Roti®-Splish RS regenerating salt for dishwashers, coarse grained

número de artículo: NH60
Versión: 3.0 es
Reemplaza la versión de: 07.05.2015
Versión: 2.1

fecha de emisión: 04.05.2015
Revisión: 09.05.2017

SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Identificación de la sustancia	Cloruro de sodio
Número de artículo	NH60
Número de registro (REACH)	Esta información no está disponible.
Número CE	231-598-3
Número CAS	7647-14-5

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados: producto químico de laboratorio

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Carl Roth GmbH + Co KG
Schoemperlenstr. 3-5
D-76185 Karlsruhe
Alemania

Teléfono: +49 (0) 721 - 56 06 0
Fax: +49 (0) 721 - 56 06 149
e-mail: sicherheit@carlroth.de
Sitio web: www.carlroth.de

Persona competente responsable de la ficha de datos de seguridad : Department Health, Safety and Environment

e-mail (persona competente) : sicherheit@carlroth.de

1.4 Teléfono de emergencia

Servicios de Información para casos de emergencia : Poison Centre Munich: +49/(0)89 19240

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

Esta sustancia no reúne los criterios para ser clasificada conforme al Reglamento no 1272/2008/CE.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado según el Reglamento (CE) no 1272/2008 (CLP)

no es necesario

Palabra de advertencia : no es necesario



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

2.3 Otros peligros

No hay información adicional.

SECCIÓN 3: Composición/Información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Nombre de la sustancia	Common salt
Número CE	231-598-3
Número CAS	7647-14-5
Fórmula molecular	NaCl
Masa molar	58,44 g/mol

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios**Notas generales**

Quitar las prendas contaminadas.

En caso de inhalación

Proporcionar aire fresco.

En caso de contacto con la piel

Aclararse la piel con agua/ducharse.

En caso de contacto con los ojos

Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Si aparece malestar o en caso de duda consultar a un médico.

En caso de ingestión

Enjuagarse la boca. Llamar a un médico si la persona se encuentra mal.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Náuseas, Vómitos

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

ninguno

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Coordinar las medidas de extinción con los alrededores
agua pulverizada, espuma, polvo extinguidor seco, dióxido de carbono (CO₂)

Medios de extinción no apropiados

chorro de agua

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

No combustible.

Productos de combustión peligrosos

En caso de incendio pueden formarse: cloruro de hidrógeno (HCl)

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Luchar contra el incendio desde una distancia razonable, tomando las precauciones habituales. Llevar un aparato de respiración autónomo.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia

No respirar el polvo.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

Manteniendo el producto alejado de los desagües y de las aguas superficiales y subterráneas.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Consejos sobre la manera de contener un vertido

Cierre de desagües.

Indicaciones adecuadas sobre la manera de limpiar un vertido

Recoger mecánicamente.

Otras indicaciones relativas a los vertidos y las fugas

Colocar en recipientes apropiadas para su eliminación.

6.4 Referencia a otras secciones

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5. Equipo de protección personal: véase sección 8. Materiales incompatibles: véase sección 10. Consideraciones relativas a la eliminación: véase sección 13.

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

No son necesarias medidas especiales.

Recomendaciones sobre medidas generales de higiene en el trabajo

Lavar las manos antes de las pausas y al fin del trabajo. No comer, beber ni fumar en las zonas de trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener el recipiente herméticamente cerrado. Almacenar en un lugar seco.

Sustancias o mezclas incompatibles

Observe el almacenamiento compatible de productos químicos.

Atención a otras indicaciones

• Requisitos de ventilación

Utilización de ventilación local y general.

• Diseño específico de locales o depósitos de almacenamiento

Temperatura de almacenaje recomendada: 15 – 25 °C.

7.3 Usos específicos finales

No existen informaciones.

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Valores límites nacionales

Valores límites de exposición profesional (límites de exposición en el lugar de trabajo)

No se dispone de datos.

8.2 Controles de exposición

Medidas de protección individual (equipo de protección personal)



Protección de los ojos/la cara

Utilizar gafas de protección con con protección a los costados.

Protección de la piel

• protección de las manos

Úsense guantes adecuados. Adecuado es un guante de protección química probado según la norma EN 374.

• tipo de material

NBR (Goma de nitrilo)

• **espesor del material**

>0,11 mm

• **tiempo de penetración del material con el que están fabricados los guantes**

>480 minutos (permeación: nivel 6)

• **otras medidas de protección**

Hacer períodos de recuperación para la regeneración de la piel. Están recomendados los protectores de piel preventivos (cremas de protección/pomadas).

Protección respiratoria

Protección respiratoria es necesaria para: Formación de polvo. Filtro de partículas (EN 143). P1 (filtra al menos 80 % de las partículas atmosféricas, código de color: blanco).

Controles de exposición medioambiental

Manteniendo el producto alejado de los desagües y de las aguas superficiales y subterráneas.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Aspecto

Estado físico	sólido (cristalinas)
Color	incolor
Olor	inodoro
Umbral olfativo	No existen datos disponibles

Otros parámetros físicos y químicos

pH (valor)	5 – 7 (100 g/l, 20 °C)
Punto de fusión/punto de congelación	801 °C
Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	1.461 °C
Punto de inflamación	no es aplicable
Tasa de evaporación	no existen datos disponibles
Inflamabilidad (sólido, gas)	No inflamable

Límites de explosividad

• límite inferior de explosividad (LIE)	esta información no está disponible
• límite superior de explosividad (LSE)	esta información no está disponible
Límites de explosividad de nubes de polvo	estas informaciones no están disponibles
Presión de vapor	1,3 hPa a 865 °C
Densidad	2,17 g/cm³ a 20 °C
Densidad de vapor	Esta información no está disponible.
Densidad aparente	~ 1.140 kg/m³
Densidad relativa	Las informaciones sobre esta propiedad no están disponibles.

Solubilidad(es)

Hidrosolubilidad 358 g/l a 20 °C

Coefficiente de reparto

n-octanol/agua (log KOW)

Esta información no está disponible.

Temperatura de auto-inflamación

Las informaciones sobre esta propiedad no están disponibles.

Temperatura de descomposición

no existen datos disponibles

Viscosidad

no relevantes (materia sólida)

Propiedades explosivas

No se clasificará como explosiva

Propiedades comburentes

ninguno

9.2 Otros datos

No hay información adicional.

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad**10.1 Reactividad**

Este material no es reactivo bajo condiciones ambientales normales.

10.2 Estabilidad química

El material es estable bajo condiciones ambientales normales y en condiciones previsibles de temperatura y presión durante su almacenamiento y manipulación.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacción exotérmica con: Metales alcalinos

10.4 Condiciones que deben evitarse

Humedad.

10.5 Materiales incompatibles

No hay información adicional.

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Productos de combustión peligrosos: véase sección 5.

SECCIÓN 11: Información toxicológica**11.1 Información sobre los efectos toxicológicos****Toxicidad aguda**

No se clasificará como toxicidad aguda.

Vía de exposición	Parámetro	Valor	Especie	Fuente
oral	LD50	3.000 mg/kg	rata	RTECS
cutánea	LD50	>10.000 mg/kg	conejo	RTECS

Corrosión o irritación cutánea

No se clasificará como corrosivo/irritante para la piel.

Lesiones oculares graves o irritación ocular

No se clasificará como causante de lesiones oculares graves o como irritante ocular.

Sensibilización respiratoria o cutánea

No se clasificará como sensibilizante respiratoria o sensibilizante cutánea.

Resumen de la evaluación de las propiedades CMR

No se clasificará como mutágeno en células germinales, carcinógeno ni tóxico para la reproducción

• Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición única).

• Toxicidad específica en determinados órganos - exposición repetida

No se clasifica como tóxico específico en determinados órganos (exposición repetida).

Peligro por aspiración

No se clasifica como peligroso en caso de aspiración.

Síntomas relacionados con las características físicas, químicas y toxicológicas

• En caso de ingestión

vómitos, náuseas

• En caso de contacto con los ojos

causa irritación de ligera a moderada

• En caso de inhalación

no se dispone de datos

• En caso de contacto con la piel

no se dispone de datos

Otros datos

Ninguno

SECCIÓN 12: Información ecológica

12.1 Toxicidad

según 1272/2008/CE: No se clasificará como peligroso para el medio ambiente acuático.

Toxicidad acuática (aguda)

Parámetro	Valor	Especie	Fuente	Tiempo de exposición
EC50	1.000 mg/l	daphnia magna	IUCLID	48 h
LC50	7.650 mg/l	Pimephales promelas	IUCLID	96 h

12.2 Procesos de degradación

Métodos para determinar la desintegración no se pueden aplicar para materiales inorgánicos.

- 12.3 Potencial de bioacumulación**
No se dispone de datos.
- 12.4 Movilidad en el suelo**
No se dispone de datos.
- 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB**
No se dispone de datos.
- 12.6 Otros efectos adversos**
No se dispone de datos.

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

- 13.1 Métodos para el tratamiento de residuos**
Contactar al eliminador aprobado correspondiente para una eliminación de residuos.
Información pertinente para el tratamiento de las aguas residuales
No tirar los residuos por el desagüe.
- 13.2 Disposiciones sobre prevención de residuos**
La coordinación de los números de clave de los residuos/marcas de residuos según CER hay que efectuarla específicamente de ramo y proceso.
- 13.3 Observaciones**
Los residuos se deben clasificar en las categorías aceptadas por los centros locales o nacionales de tratamiento de residuos. Por favor considerar las disposiciones nacionales o regionales pertinentes.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

- 14.1 Número ONU** (no está sometido a las reglamentaciones de transporte)
- 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas** no relevantes
- 14.3 Clase(s) de peligro para el transporte** no relevantes
Clase -
- 14.4 Grupo de embalaje** no relevantes
- 14.5 Peligros para el medio ambiente** ninguno (no peligroso para el medio ambiente conforme al reglamento para el transporte de mercancías peligrosas)
- 14.6 Precauciones particulares para los usuarios**
No hay información adicional.
- 14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio MARPOL y del Código IBC**
El transporte a granel de la mercancía no está previsto.
- 14.8 Información para cada uno de los Reglamentos tipo de las Naciones Unidas**
• Transporte de mercancías peligrosas por carretera, por ferrocarril o por vía navegable (ADR/RID/ADN)
No está sometido al ADR, RID y al ADN.

- **Código marítimo internacional de mercancías peligrosas (IMDG)**

No está sometido al IMDG.

- **Organización de Aviación Civil Internacional (OACI-IATA/DGR)**

No está sometido a la OACI-IATA.

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones pertinentes de la Unión Europea (UE)

- **Reglamento 649/2012/UE relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos (PIC)**

No incluido en la lista.

- **Reglamento 1005/2009/CE sobre las sustancias que agotan la capa de ozono (SAO)**

No incluido en la lista.

- **Reglamento 850/2004/CE sobre contaminantes orgánicos persistentes (POP)**

No incluido en la lista.

- **Restricciones conforme a REACH, Anexo XVII**

no incluido en la lista

- **Lista de sustancias sujetas a autorización (REACH, Anexo XIV)**

no incluido en la lista

Directiva 2011/65/UE sobre restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas en aparatos eléctricos y electrónicos (RoHS) - Anexo II

no incluido en la lista

Reglamento 166/2006/CE relativo al establecimiento de un registro europeo de emisiones y transferencias de contaminantes (PRTR)

no incluido en la lista

Directiva 2000/60/CE por la que se establece un marco comunitario de actuación en el ámbito de la política de aguas

no incluido en la lista

Catálogos nacionales

La sustancia es enumerada en los siguientes inventarios nacionales:

- EINECS/ELINCS/NLP (Europa)
- DSL/NDSL (Canadá)
- REACH (Europa)
- Toxic Substance Control Act (TSCA)

15.2 Evaluación de la seguridad química

No se ha realizado una evaluación de la seguridad química de esta sustancia.

SECCIÓN 16: Otra información

16.1 Indicación de modificaciones (ficha de datos de seguridad revisada)

Sección	Inscripción anterior (texto/valor)	Inscripción actual (texto/valor)	Relevante para la seguridad
8.1	Valores límites de exposición profesional (límites de exposición en el lugar de trabajo): no relevantes	Valores límites de exposición profesional (límites de exposición en el lugar de trabajo): No se dispone de datos.	sí
14.8		+ Organización de Aviación Civil Internacional (OACI-IATA/DGR): No está sometido a la OACI-IATA.	sí

Abreviaturas y los acrónimos

Abrev.	Descripciones de las abreviaturas utilizadas
ADN	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par voies de navigation intérieures (Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Vías Navegables Interiores)
ADR	Accord européen relatif au transport international des marchandises dangereuses par route (Acuerdo europeo relativo al transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera)
CAS	Chemical Abstracts Service (número identificador único carente de significado químico)
CLP	Reglamento (CE) no 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado (Classification, Labelling and Packaging) de sustancias y mezclas
CMR	Carcinógeno, Mutágeno o tóxico para la Reproducción
DGR	Dangerous Goods Regulations (reglamento para el transporte de mercancías peligrosas, véase IATA/DGR)
EINECS	European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (catálogo europeo de sustancias químicas comercializadas)
ELINCS	European List of Notified Chemical Substances (lista europea de sustancias químicas notificadas)
IATA	Asociación Internacional de Transporte Aéreo
IATA/DGR	Dangerous Goods Regulations (DGR) for the air transport (IATA) (Reglamento para el transporte de mercancías peligrosas por aire)
IMDG	International Maritime Dangerous Goods Code (código marítimo internacional de mercancías peligrosas)
MARPOL	el convenio internacional para prevenir la contaminación por los buques (abr. de "Marine Pollutant")
mPmB	muy persistente y muy bioacumulable
NLP	No-Longer Polymer (ex-polímero)
OACI	Organisation de l'Aviation Civile Internationale
PBT	Persistente, Bioacumulable y Tóxico
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (registro, evaluación, autorización y restricción de las sustancias y preparados químicos)
RID	Règlement concernant le transport International ferroviaire des marchandises Dangereuses (Reglamento referente al transporte internacional por ferrocarril de mercancías peligrosas)
SGA	"Sistema Globalmente Armonizado de clasificación y etiquetado de sustancias químicas" elaborado por Naciones Unidas

A6. Acetona (C₃H₆O)



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 31.05.2017

Versión 20.6

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número	100014
Denominación	Acetona para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur
Número de registro REACH	01-2119471330-49-XXXX
No. CAS	67-64-1

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados	Análisis químico, Producción química
	En cumplimiento de las condiciones descritas en el anexo a esta hoja de datos de seguridad.

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía	Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0
Departamento Responsable	LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia

Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20
--

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)



Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Iritación ocular, Categoría 2, H319

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única, Categoría 3, Sistema nervioso central, H336

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

EUH066 La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤ 125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

No. Índice 606-001-00-8

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancia

Formula	CH_3COCH_3	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ (Hill)
No. Índice	606-001-00-8	
No. CE	200-662-2	
Masa molar	58,08 g/mol	

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

Acetona ($\leq 100\%$)

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

67-64-1 01-2119471330-49-XXXX

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Irritación ocular, Categoría 2, H319

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única, Categoría 3, H336

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco. Llamar al médico.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.

Aclararse la piel con agua/ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. En caso necesario, llamar al oftalmólogo. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: cuidado con los vómitos. ¡Peligro de aspiración! Mantener libres las vías respiratorias. Posible obstrucción pulmonar tras aspiración del vómito. Llame inmediatamente al médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, Somnolencia, Vértigo, narcosis, Náusea, Vómitos, Trastornos del estómago/intestinales, Dolor de cabeza, sueño, Salivación, Coma

Riesgo de turbidez en la córnea.

Acción desengrasante con formación de piel resquebrajada y agrietada.

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Dióxido de carbono (CO₂), Espuma, Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

Prestar atención al retorno de la llama.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

Otros datos

Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios. Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: Evitar el contacto con la sustancia. No respirar los vapores, aerosoles. Asegúrese una ventilación apropiada. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, con sulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia: Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No tirar los residuos por el desagüe. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames.

Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10).

Recoger con materiales absorbentes, p. ej. con Chemisorb®. Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Trabajar bajo campana extractora. No inhalar la sustancia/la mezcla. Evítese la generación de vapores/aerosoles.

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición. Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel. Lavar cara y manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Protejido de la luz.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Véase el escenario de exposición en el anexo de ésta FDS.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

Componentes

Base	Valor	Limites umbrales	Observaciones
------	-------	------------------	---------------

Acetona (67-64-1)

EU ELV	Límite máximo permisible de exposición promedio ponderado en tiempo	500 ppm 1.210 mg/m ³	
VLA (ES)	Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria (VLA-ED)	500 ppm 1.210 mg/m ³	

Nivel sin efecto derivado (DNEL)

DNEL trabajador, agudo	Efectos locales	Inhalativo	2420 mg/m ³
DNEL trabajador, crónico	efectos sistémicos	dérmica	186 mg/kg Peso corporal
DNEL trabajador, crónico	efectos sistémicos	Inhalativo	1210 mg/m ³
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	dérmica	62 mg/kg Peso corporal
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	Inhalativo	200 mg/m ³
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	oral	62 mg/kg Peso corporal

Procedimientos de control recomendados

Los métodos para la medición de la atmósfera del puesto de trabajo deben cumplir con los requisitos de las normas DIN EN 482 y DIN EN 689.

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

PNEC Agua dulce	10,6 mg/l
PNEC Agua de mar	1,06 mg/l
PNEC Sedimento de agua dulce	30,4 mg/kg
PNEC Sedimento marino	3,04 mg/kg
PNEC Suelo	29,5 mg/kg

PNEC sistema de depuración de aguas residuales

100 mg/l

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos / la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumerción:

Material del guante:	goma butílica
Espesor del guante:	0,7 mm
tiempo de penetración:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Latex natural
Espesor del guante:	0,6 mm
tiempo de penetración:	> 10 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumerción), KCL 706 Lapren® (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro AX (NE 371)

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No tirar los residuos por el desagüe.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma	líquido
Color	incolore
Olor	frutoso
Umbral olfativo	0,1 - 662,5 ppm
pH	5 - 6 a 395 g/l 20 °C
Punto de fusión	-95,4 °C

Punto /intervalo de ebullición	56,2 °C a 1.013 hPa
Punto de inflamación	< -20 °C Método: DIN 51755 Part 1
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	2,6 %(v)
Límite superior de explosividad	12,8 %(v)
Presión de vapor	233 hPa a 20 °C
Densidad relativa del vapor	2,01
Densidad	0,79 g/cm ³ a 20 °C
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	a 20 °C soluble
Coeficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: -0,24 (experimentalmente) No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.
Temperatura de descomposición	Destilable sin descomposición a presión normal.

Viscosidad, dinámica	0,32 mPa.s a 20 °C
Propiedades explosivas	No clasificado/a como explosivo/a.
Propiedades comburentes	ningún

9.2 Otros datos

Temperatura de ignición	465 °C DIN 51794
Conductibilidad	0,01 μ S/cm a 20 °C

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

Sensibilidad a la luz

Sensible al aire.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

ácido cromosulfúrico, cromilo cloruro, etanolamina, Flúor, Agentes oxidantes fuertes, reductores fuertes, Ácido nítrico, cromo(VI)óxido

Riesgo de explosión con:

oxihalogenuros no metálicos, halogenuros de halógeno, Cloroformo, ácido nitrante, nitrosilos, peróxido de hidrógeno/agua oxigenada, halogenóxidos, nitrocompuestos orgánicos, peróxidos

Reacción exotérmica con:

Bromo, Metales alcalinos, hidróxidos alcalinos, Hidrocarburo halogenado, Dicloruro de azufre, oxiclорuro de fósforo

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

goma, plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 5.800 mg/kg

(ECHA)

Síntomas: Trastornos del estómago/intestinales, Existe riesgo de aspiración al vomitar., Posible obstrucción pulmonar tras aspiración del vómito.

Toxicidad aguda por inhalación

CL50 Rata: 76 mg/l; 4 h ; vapor

(Literatura)

Síntomas: irritación de las mucosas

Toxicidad cutánea aguda

DL50 Conejo: 20.000 mg/kg

(IUCLID)

Irritación de la piel

Conejo

Resultado: Sin irritación

(Ficha de datos de Seguridad externa)

La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel.

Imitación ocular

Conejo

Resultado: Imitación ocular

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Provoca imitación ocular grave.

Riesgo de turbidez en la córnea.

Sensibilización

Prueba de Maximización Conejillo de indias

Resultado: negativo

(ECHA)

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vivo

Ensayo de micronúcleos

Resultado: negativo

(National Toxicology Program)

Genotoxicidad in vitro

Mutagenicidad (ensayo de células de mamífero): ensayo de aberración cromosómica.

Resultado: negativo

Método: OECD TG 473

Prueba de Ames

Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

Método: OECD TG 471

Carcinogenicidad

No muestra efectos cancerígenos en experimentos con animales. (IUCLID)

Toxicidad para la reproducción

Esta información no está disponible.

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Puede provocar somnolencia o vértigo.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Tras absorción:

Dolor de cabeza, Salivación, Náusea, Vómitos, Vértigo, narcosis, Coma

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

CL50 *Oncorhynchus mykiss* (Trucha irisada): 5.540 mg/l; 96 h

(Literatura)

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos

CE50 *Daphnia magna* (Pulga de mar grande): 6.100 mg/l; 48 h

(Literatura)

EC5 *E. sulcatum*: 28 mg/l; 72 h

(concentración tóxica límite) (Literatura)

Toxicidad para las algas

NOEC *M. aeruginosa*: 530 mg/l; 8 d

Controlo analítico: no

DIN 38412

(concentración tóxica límite) (IUCLID)

Toxicidad para las bacterias

CE50 lodo activado: 59 - 67,4 mg/l; 30 min

(Literatura)

EC5 *Pseudomonas putida*: 1.700 mg/l; 16 h
(concentración tóxica límite) (IUCLID)

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

91 %; 28 d

(IUCLID)

Fácilmente biodegradable.

Demanda bioquímica de oxígeno (DBO)

1.850 mg/g (5 d)

(IUCLID)

Demanda química de oxígeno (DQO)

2.070 mg/g

(IUCLID)

Demanda teórica de oxígeno (DTO)

2.200 mg/g

(Literatura)

12.3 Potencial de bioacumulación

Coefficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: -0,24

(experimentalmente)

No es de esperar una bioacumulación. (Literatura)

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

12.6 Otros efectos adversos

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 Número ONU UN 1090

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas Acetona

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios si

Código de restricciones en túneles D/E

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

14.1 Número ONU	UN 1090
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	ACETONE
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	no

Transporte marítimo (IMDG)

14.1 Número ONU	UN 1090
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	ACETONE
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	si
EmS	F-E S-D

14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC
No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

Legislación de Peligro de	SEVESO III
Accidente Importante	LÍQUIDOS INFLAMABLES
Alemania	P5c
	Cantidad 1: 5.000 t
	Cantidad 2: 50.000 t

Restricciones profesionales Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes.

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) n.º 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1\%$ p/p) según la normativa CE n.º 1907/2006 (REACH), artículo 57.

Legislación nacional

Clase de almacenamiento 3

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

H225 Líquido y vapores muy inflamables.
H319 Provoca irritación ocular grave.
H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H336 Puede provocar somnolencia o vértigo.

EUH066 La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en www.wikipedia.org.

Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A.]

C/ María de Molina, 40|28006 Madrid - España |

A7. Etanol (C₂H₆O)



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 02.02.2018

Versión 20.4

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número 159010

Denominación Etanol 96% EMSURE® Reag. Ph Eur

Número de registro REACH 01-2119457610-43-XXXX 01-2119457610-43-XXXX

No. CAS 64-17-5

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados Análisis químico, Producción química
En cumplimiento de las condiciones descritas en el anexo a esta hoja de datos de seguridad.

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0

Departamento Responsable LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Iritación ocular, Categoría 2, H319

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

No. Índice 603-002-00-5

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/ información sobre los componentes

3.1 Sustancia

Formula	C ₂ H ₅ OH	C ₂ H ₅ O (Hill)
No. Índice	603-002-00-5	
No. CE	200-578-6	
Masa molar	46,07 g/mol	

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

Etolol (>= 50 % - <= 100 %)

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

64-17-5	01-2119457610-43-	
	XXXX 01-	Líquido inflamable, Categoría 2, H225
	2119457610-43-XXXX	Imitación ocular, Categoría 2, H319

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.

Aclararse la piel con agua/ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Consultar al oftalmólogo. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: hacer beber agua inmediatamente (máximo 2 vasos). Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, parálisis respiratoria, Vértigo, bomachera, euforia, Náusea, Vómitos, narcosis

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Agua, Espuma, Dióxido de carbono (CO₂), Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Prestar atención al retorno de la llama.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.
En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

En caso de fuego, protéjase con un equipo respiratorio autónomo.

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

Reprimir los gases/vapores/neblinas con agua pulverizada.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con materiales absorbentes, p. ej. con Chemizorb®. Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición.

Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir la ropa contaminada. Lavar manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Véase el escenario de exposición en el anexo de ésta FDS.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/ protección individual

8.1 Parámetros de control

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

Componentes

Base	Valor	Límites umbrales	Observaciones
------	-------	---------------------	---------------

Etolanol (64-17-5)

VLA (ES)	Valor Límite Ambiental- Exposición de Corta Duración (VLA-EC)	1.000 ppm 1.910 mg/m ³	
----------	---	--------------------------------------	--

Nivel sin efecto derivado (DNEL)

DNEL trabajador, agudo	Efectos locales	Inhalativo	1900 mg/m ³
DNEL trabajador, crónico	efectos sistémicos	dérmica	343 mg/kg Peso corporal
DNEL trabajador, crónico	efectos sistémicos	Inhalativo	950 mg/m ³
DNEL consumidor, agudo	Efectos locales	Inhalativo	950 mg/m ³
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	dérmica	206 mg/kg Peso corporal
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	Inhalativo	114 mg/m ³
DNEL consumidor, prolongado	efectos sistémicos	oral	87 mg/kg Peso corporal

Procedimientos de control recomendados

Los métodos para la medición de la atmósfera del puesto de trabajo deben cumplir con los requisitos de las normas DIN EN 482 y DIN EN 689.

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

PNEC Agua dulce	0,96 mg/l
PNEC Agua de mar	0,79 mg/l
PNEC Sedimento de agua dulce	3,6 mg/kg
PNEC Suelo	0,63 mg/kg
PNEC Liberación periódica al agua	2,75 mg/l

PNEC sistema de depuración de aguas residuales	580 mg/l
PNEC oral	720 mg/kg

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumerción:

Material del guante:	goma butílica
Espesor del guante:	0,7 mm
Tiempo de penetración:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,40 mm
Tiempo de penetración:	> 120 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumerción), KCL 730 Camatril® -Velours (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma	líquido
Color	incolore
Olor	alcoólico alcohólico
Umbral olfativo	0,1 - 5058,5 ppm

pH	7,0 a 10 g/l 20 °C
Punto de fusión	-117 °C
Punto /intervalo de ebullición	78 °C a 1.013 hPa
Punto de inflamación	17 °C
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límites inferior de explosividad	3,1 %(v)
Límite superior de explosividad	27,7 %(v)
Presión de vapor	aprox.59 hPa a 20 °C
Densidad relativa del vapor	No hay información disponible.
Densidad	0,805 - 0,812 g/cm3 a 20 °C
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	a 20 °C soluble

Coeficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: -0,31 (experimentalmente) (Literatura) No es de esperar una bioacumulación.
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.
Temperatura de descomposición	Destilable sin descomposición a presión normal.
Viscosidad, dinámica	1,2 mPa.s a 20 °C
Propiedades explosivas	No clasificado/a como explosivo/a.
Propiedades comburentes	ningún

9.2 Otros datos

Temperatura de ignición	425 °C
-------------------------	--------

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

El producto es químicamente estable bajo condiciones normales (a temperatura ambiental).

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Riesgo de explosión/reacción exotérmica con:

peróxido de hidrógeno/agua oxigenada, percloratos, ácido perclórico, Ácido nítrico, mercurio(II) nitrato, ácido permangánico, Nitrilos, peróxidos, Agentes oxidantes fuertes, nitrosilos, Peróxidos, sodio, Potasio, halogenóxidos, Hipoclorito de calcio, dióxido de nitrógeno, óxidos metálicos, hexafluoruro de uranio, yoduros, Cloro, Metales alcalinos, Metales alcalinotérreos, óxidos alcalinos, Óxido de etileno

plata, con, Ácido nítrico

compuestos de plata, con, Amoniacó

permanganato de potasio, con, ácido sulfúrico concentrado

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

halogenuros de halógeno, cromo(VI)óxido, cromilo cloruro, Flúor, hidruros, Oxidos de fósforo, platino

Ácido nítrico, con, permanganato de potasio

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

goma, plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 10.470 mg/kg

Directrices de ensayo 401 del OECD

Síntomas: Náusea, Vómitos

Toxicidad aguda por inhalación

CL50 Rata: 124,7 mg/l; 4 h ; vapor

Directrices de ensayo 403 del OECD

Síntomas: Consecuencias posibles:, irritación de las mucosas

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

Imitación de la piel

Conejo

Resultado: No irita la piel

Directrices de ensayo 404 del OECD

Una exposición repetida o prolongada puede causar irritación de la piel y dermatitis debido a las propiedades desengrasantes del producto.

Imitación ocular

Conejo

Resultado: Irritación ocular

Directrices de ensayo 405 del OECD

Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización

Ensayo respecto a sensibilización (Magnusson y Kligman):

Resultado: negativo

(IUCLID)

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

Método: Directrices de ensayo 471 del OECD

Ensayo de mutación genética de células de mamífero in vitro

Mouse lymphoma test

Resultado: negativo

Método: OECD TG 476

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad para la reproducción

Vía de aplicación: Oral

Ratón

Método: Directrices de ensayo 416 del OECD

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Efectos sistémicos:

euforia

Tras absorción:

Vértigo, borrachera, narcosis, parálisis respiratoria

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

CL50 *Leuciscus idus* (Carpa dorada): 8.140 mg/l; 48 h

(IUCLID)

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos

EC5 *E. sulcatum*: 65 mg/l; 72 h

(Literatura)

CE50 *Daphnia magna* (Pulga de mar grande): 9.268 - 14.221 mg/l; 48 h
(IUCLID)

Toxicidad para las algas

IC5 *Scenedesmus quadricauda* (alga verde): 5.000 mg/l; 7 d
(Literatura)

Toxicidad para las bacterias

EC5 *Pseudomonas putida*: 6.500 mg/l; 16 h
(IUCLID)

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos (Toxicidad crónica)

Ensayo semiestático NOEC *Daphnia magna* (Pulga de mar grande): 9,6 mg/l; 9 d
(ECHA)

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

94 %

OECD TG 301E

Fácilmente biodegradable.

Demanda bioquímica de oxígeno (DBO)

930 - 1.670 mg/g (5 d)

(Literatura)

Demanda teórica de oxígeno (DTO)

2.100 mg/g

(Literatura)

Ratio COD/ThBOD

90 %

(Literatura)

12.3 Potencial de bioacumulación

Coefficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: -0,31

(experimentalmente)

(Literatura) No es de esperar una bioacumulación.

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

12.6 Otros efectos adversos

Información ecológica complementaria

No deben esperarse interferencias en depuradoras si se usa adecuadamente.

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 Número ONU UN 1170

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas Etanol

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios si

Código de restricciones en túneles D/E

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

14.1 Número ONU	UN 1170
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	ETHANOL
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	no

Transporte marítimo (IMDG)

14.1 Número ONU	UN 1170
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	ETHANOL
14.3 Clase	3
14.4 Grupo de embalaje	II
14.5 Peligrosas ambientalmente	--
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	si

EmS F-E S-D

14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC
No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

Legislación de Peligro de Accidente Importante Alemán	SEVESO III LÍQUIDOS INFLAMABLES P5c Cantidad 1: 5.000 t Cantidad 2: 50.000 t
Restricciones profesionales	Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes.

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1$ % p/p) según la normativa CE nº 1907/2006 (REACH), artículo 57.

Legislación nacional

Clase de almacenamiento 3

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A.]

C/ María de Molina, 40|28006 Madrid - España |

Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 | email:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com |

www.merck.es

Anexo B: Imágenes de SEM

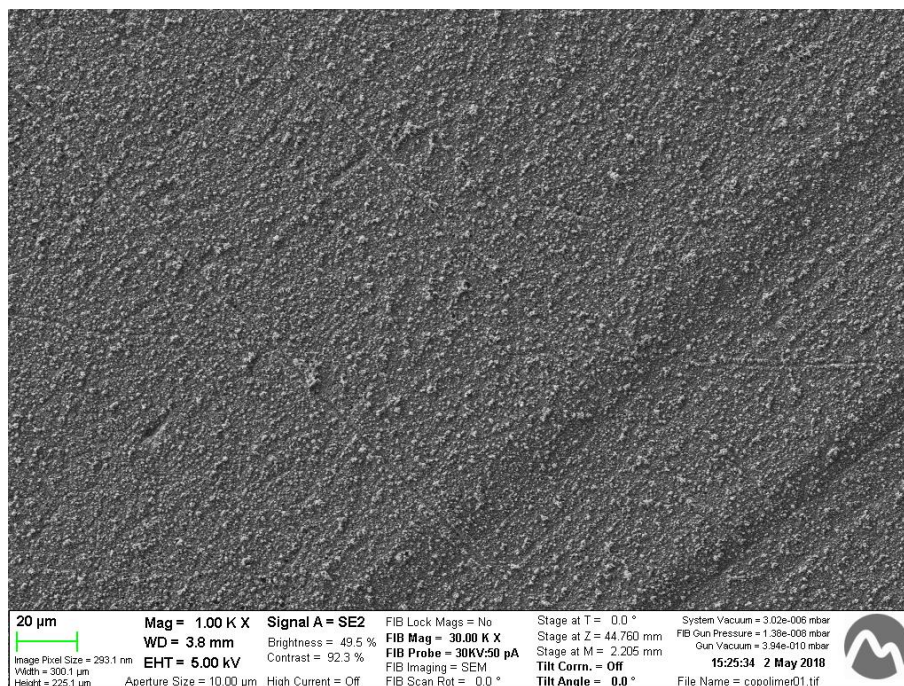


Figura 101. SEM de muestra de copolímero SE2 a 1.000 aumentos.

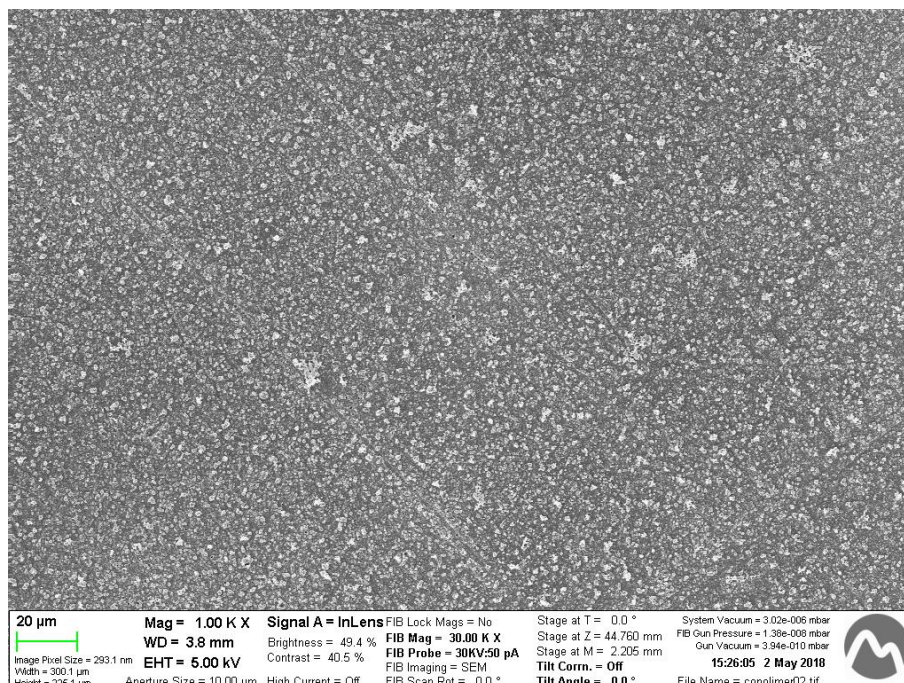


Figura 102. SEM de muestra de copolímero inLens a 1.000 aumentos.

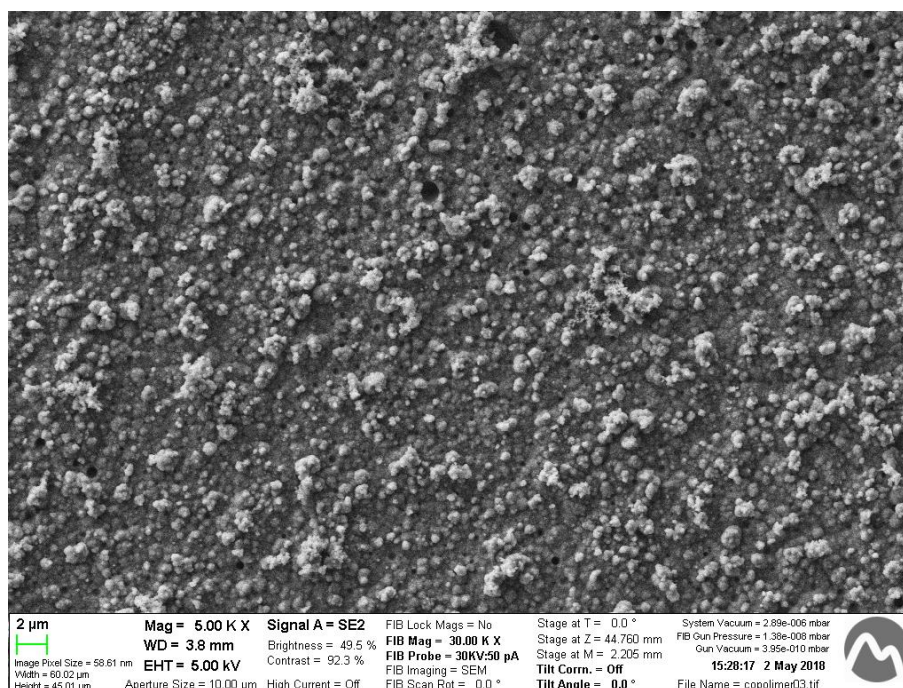


Figura 103. SEM de muestra de copolímero SE2 a 5.000 aumentos.

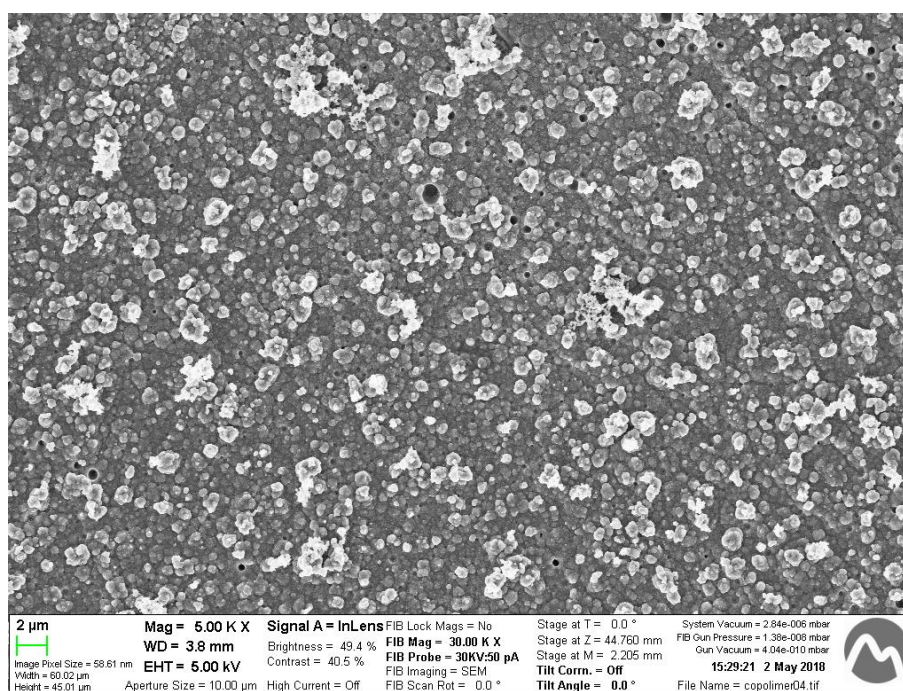


Figura 104. SEM de muestra de copolímero inLens a 5.000 aumentos.

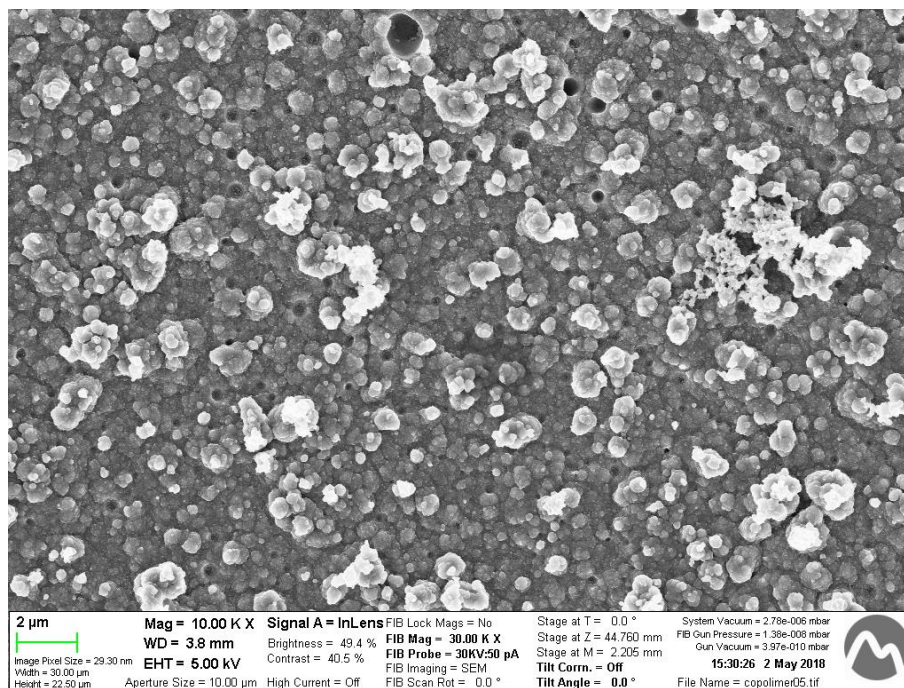


Figura 105. SEM de muestra de copolímero inLens a 10.000 aumentos.

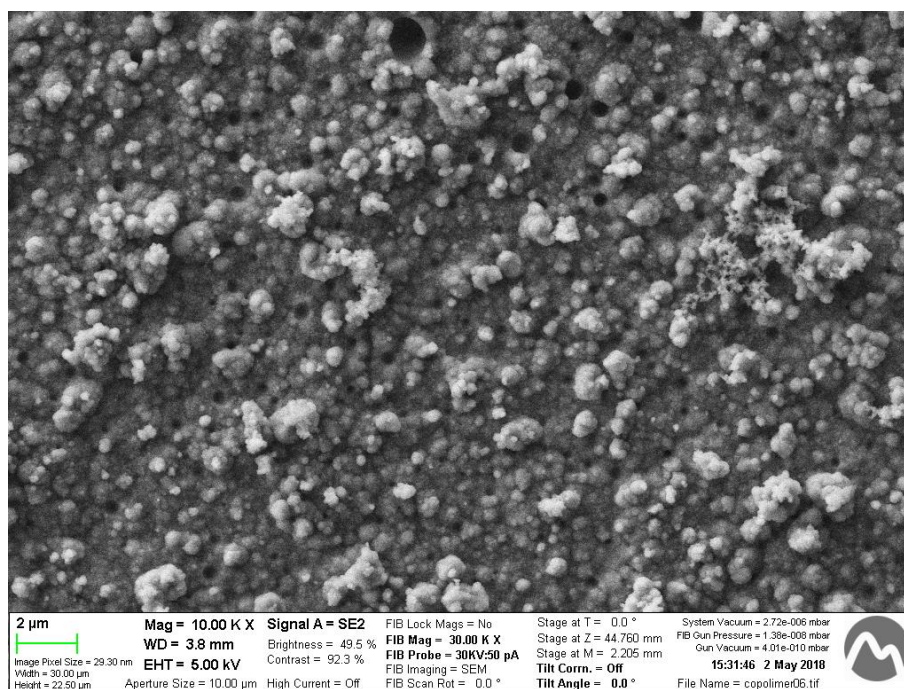


Figura 106. SEM de muestra de copolímero SE2 a 10.000 aumentos.

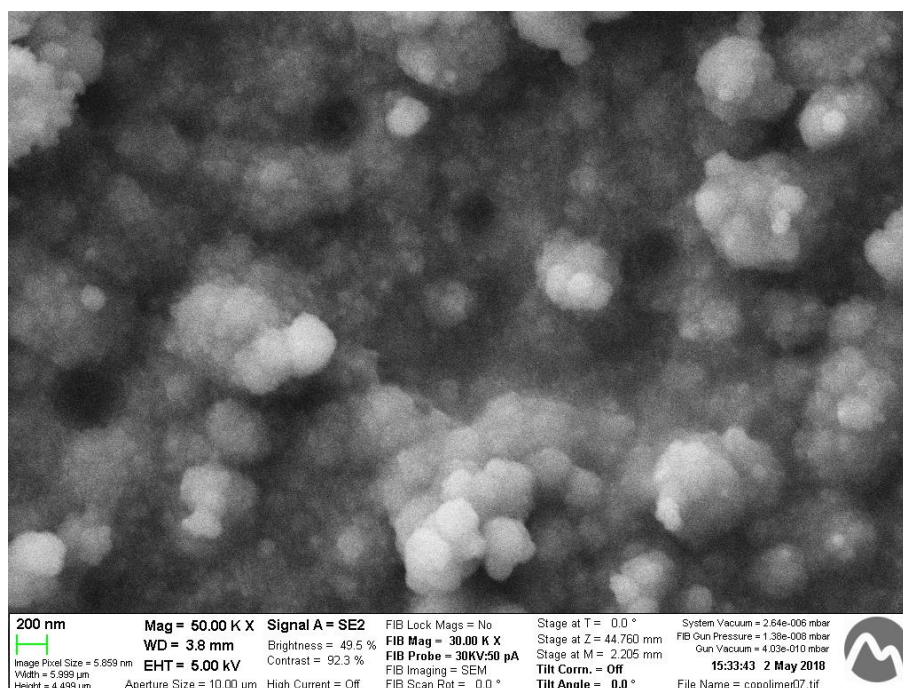


Figura 107. SEM de muestra de copolímero SE2 a 50.000 aumentos.

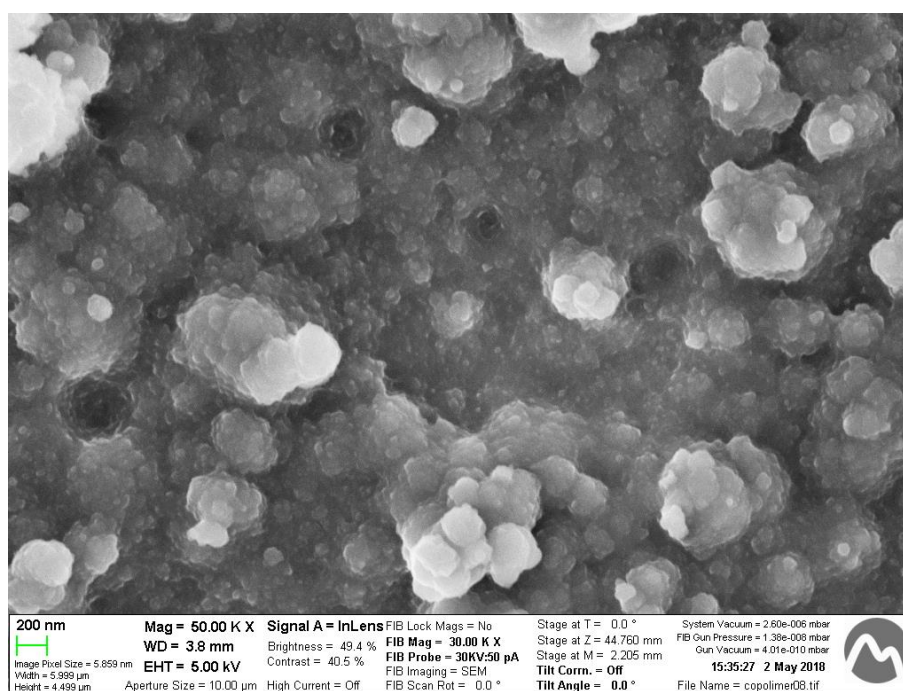


Figura 108. SEM de muestra de copolímero inLens a 50.000 aumentos.

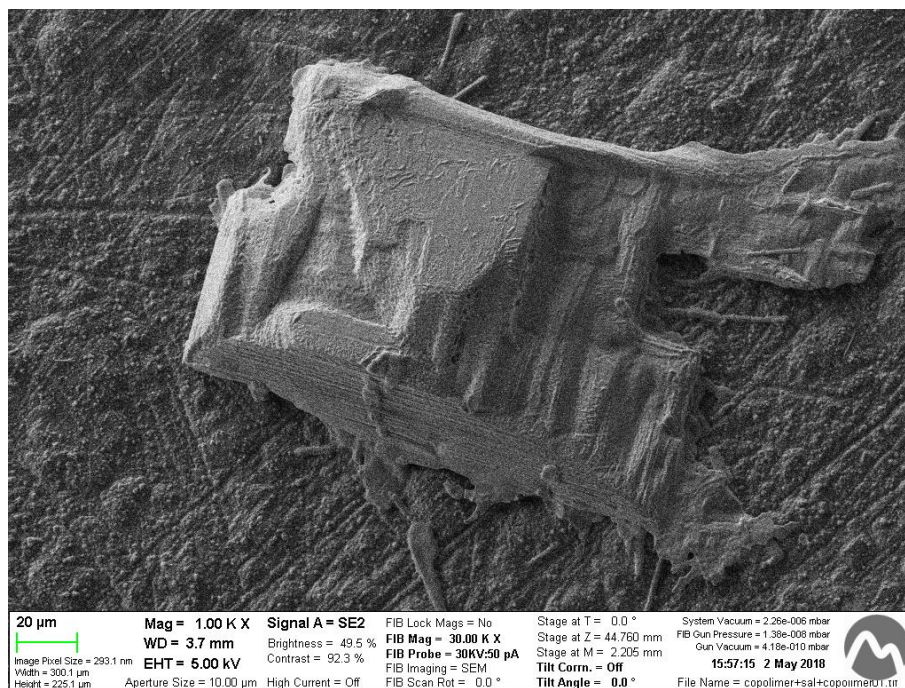


Figura 109. SEM de un cristal de NaCl SE2 1.000 aumentos.

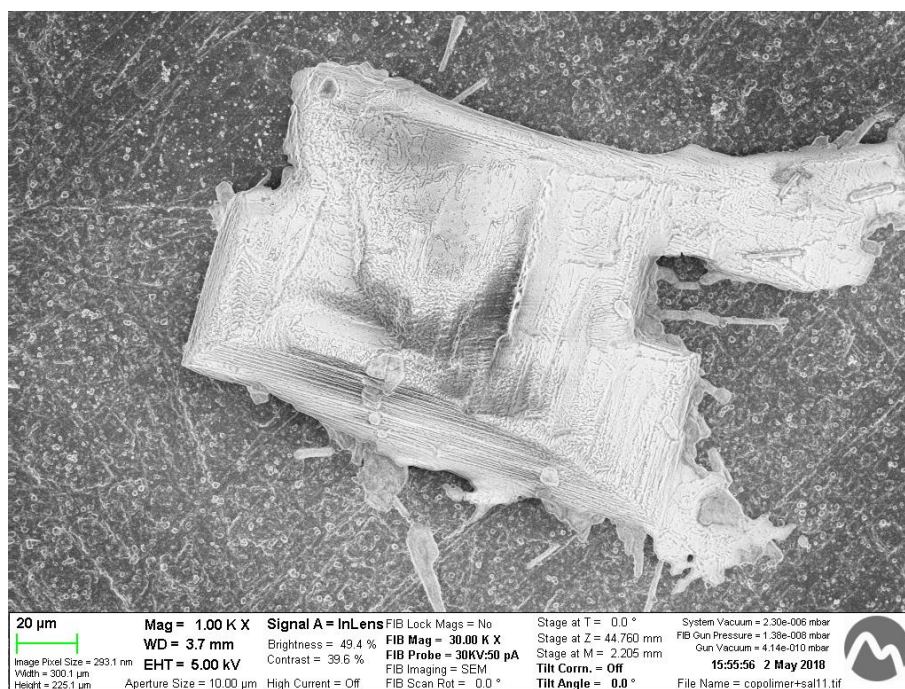


Figura 110. SEM de un cristal de NaCl inLens 1.000 aumentos.

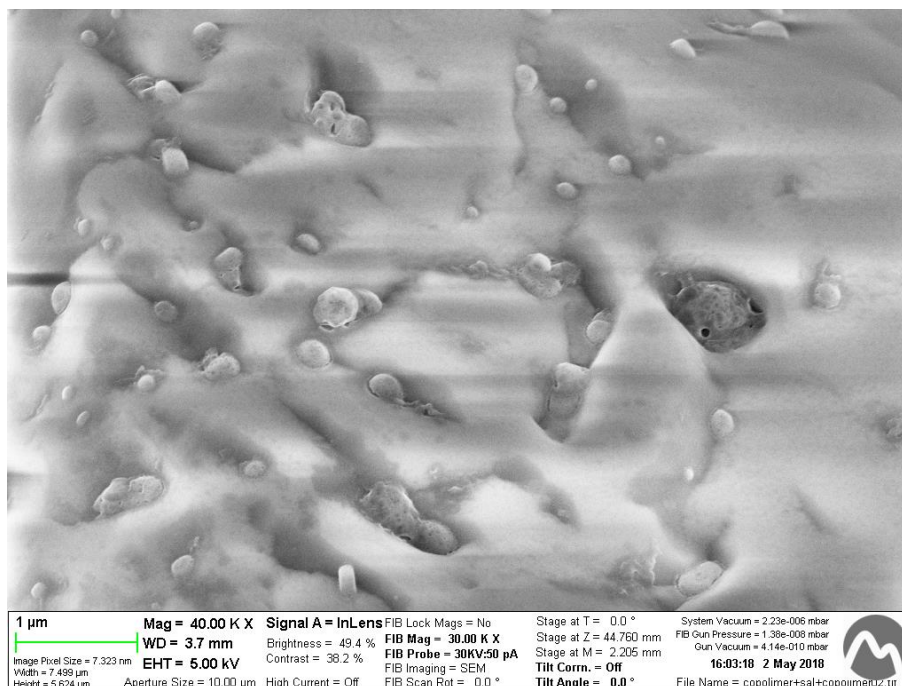


Figura 111. SEM de la muestra con interfase salina inLens a 40.000 aumentos.

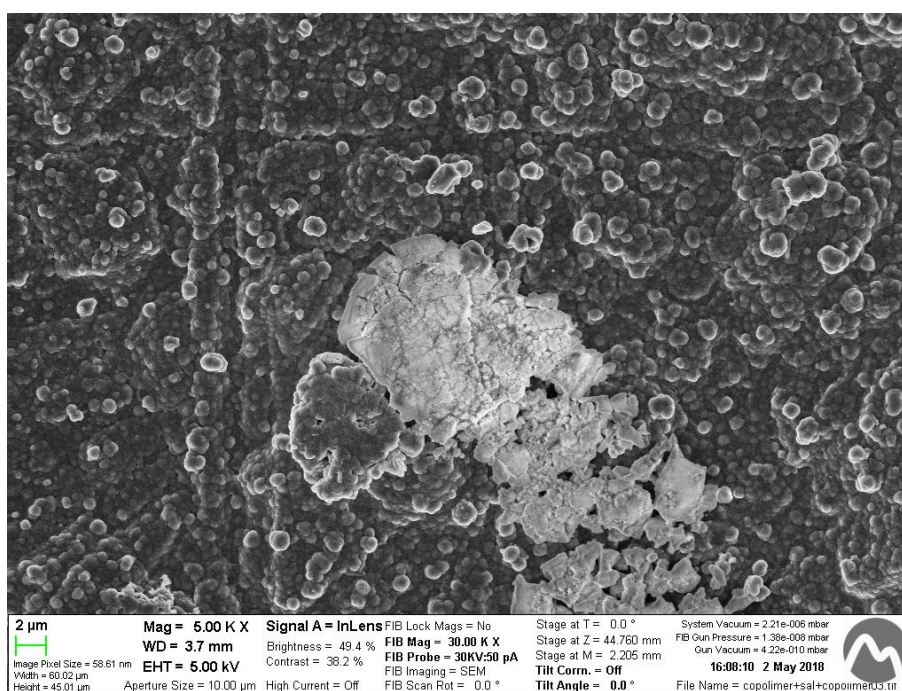


Figura 112. SEM de generación sobre cristal de NaCl inLens a 5.000 aumentos.

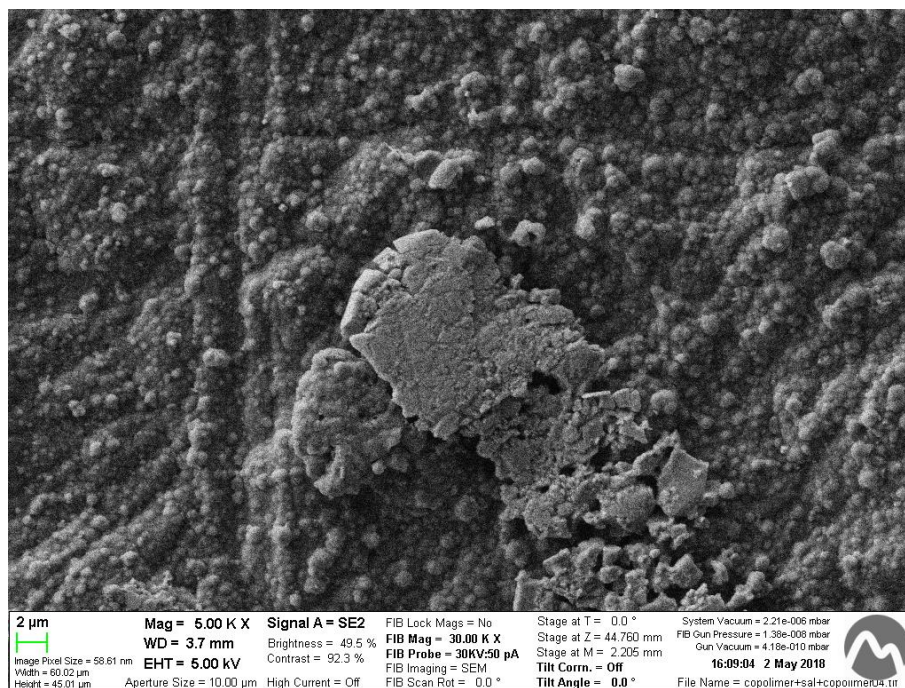


Figura 113. SEM de generació sobre cristal de NaCl SE2 a 5.000 aumentos.

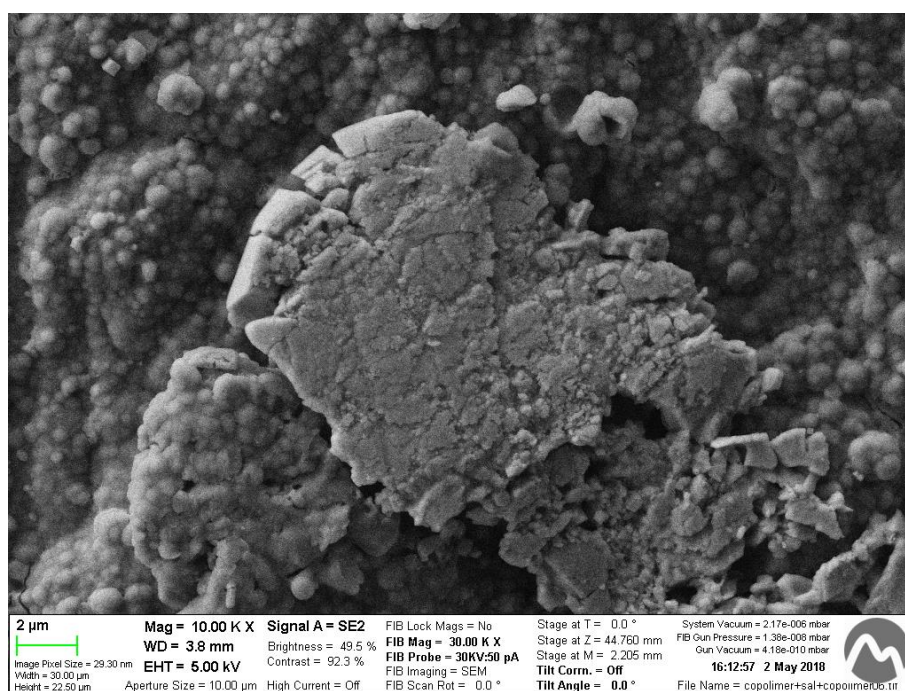


Figura 114. SEM de generació sobre cristal de NaCl SE2 a 10.000 aumentos.

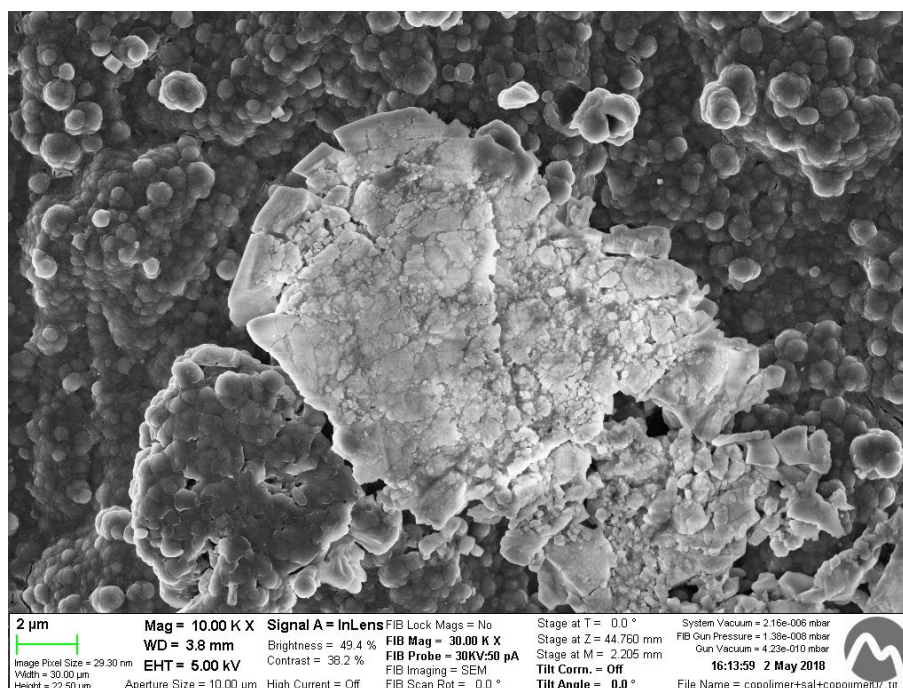


Figura 115. SEM de generación sobre cristal de NaCl inLens a 10.000 aumentos.

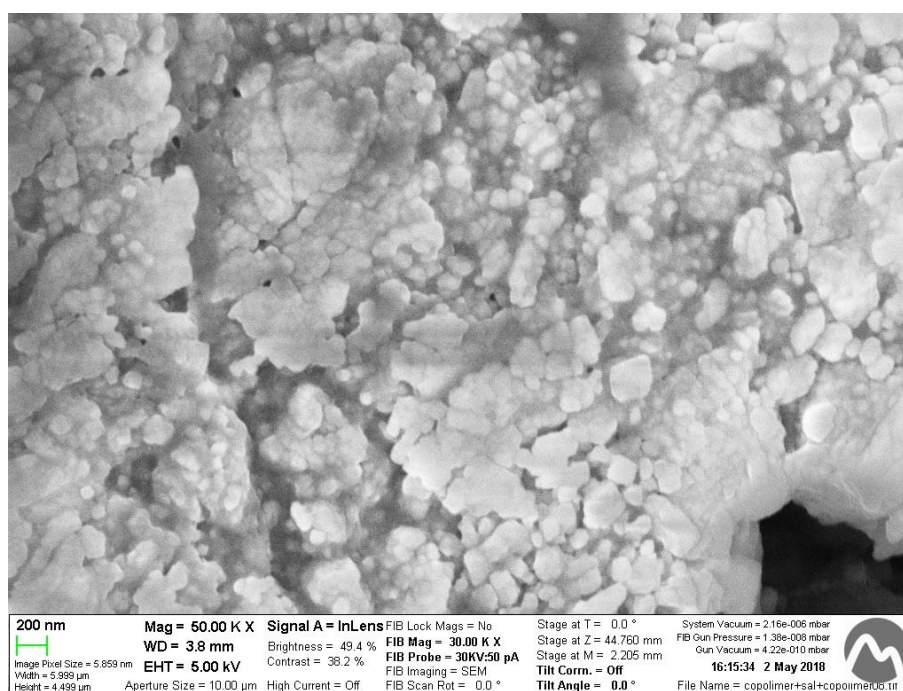


Figura 116. SEM de generación sobre cristal de NaCl inLens a 50.000 aumentos.

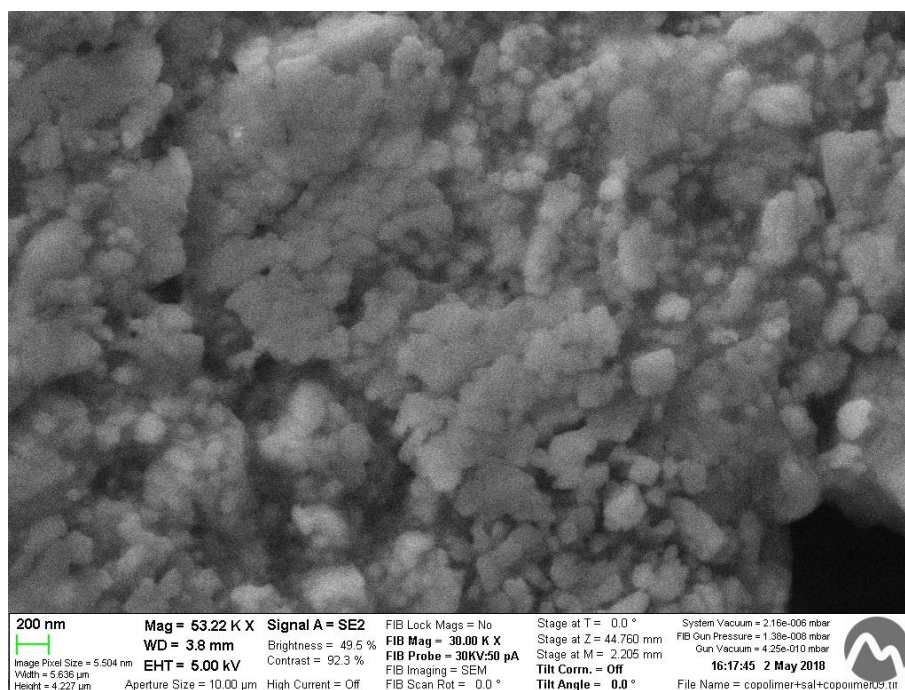


Figura 117. SEM de generación sobre cristal de NaCl SE2 a 53.220 aumentos.

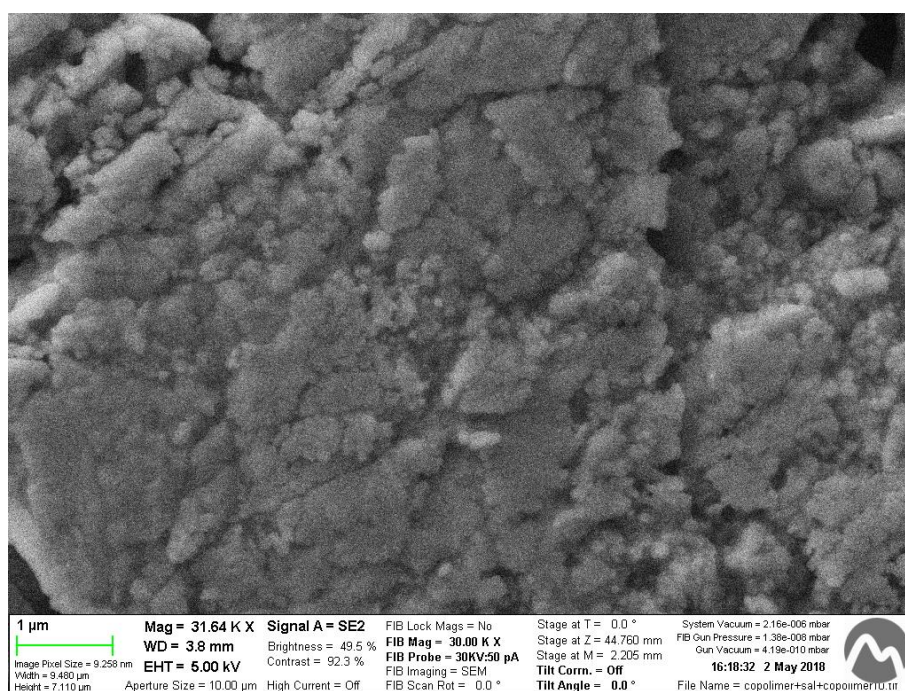


Figura 118. SEM de generación sobre cristal de NaCl SE2 a 31.640 aumentos.

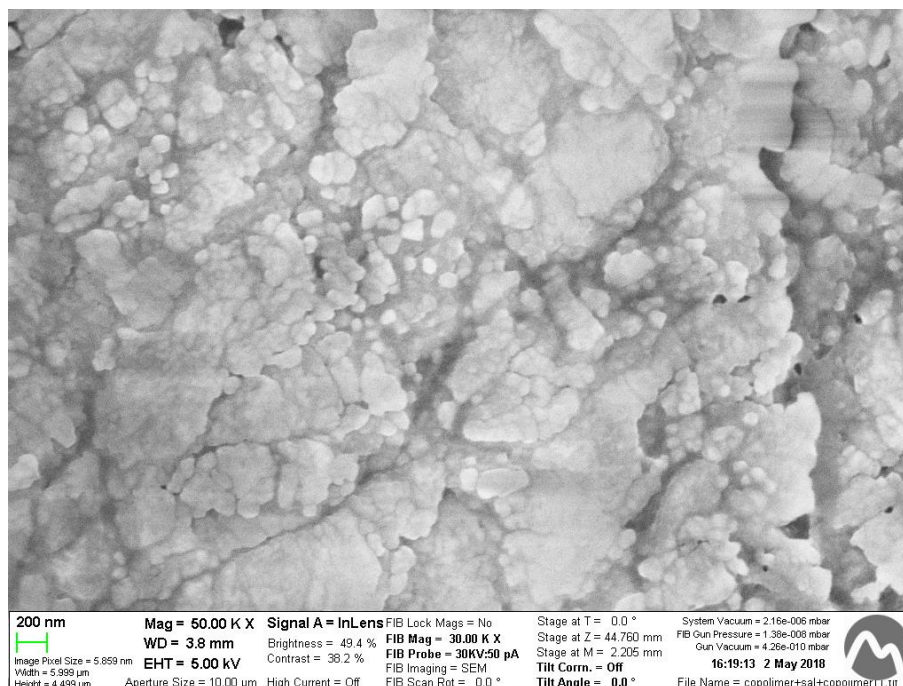


Figura 119. SEM de generación sobre cristal de NaCl inLens a 50.000 aumentos.

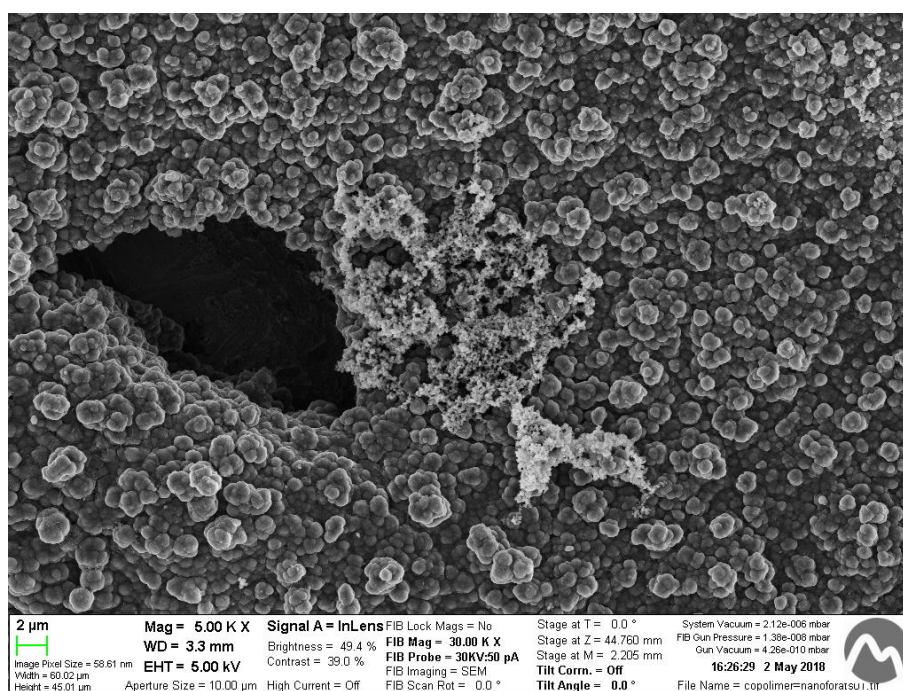


Figura 120. SEM de un poro inLens a 5.000 aumentos.

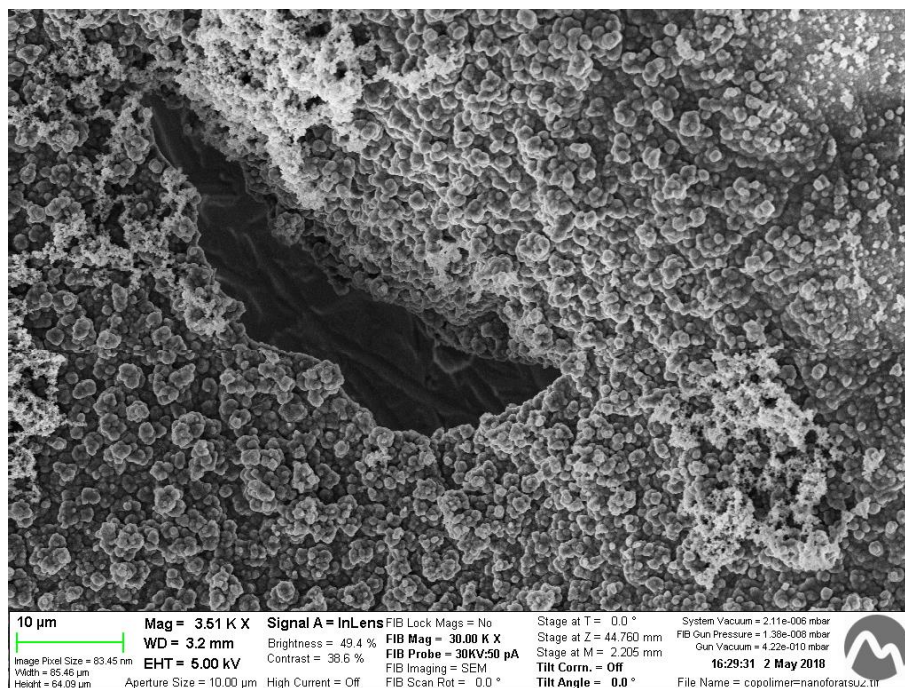


Figura 121. SEM de un poro inLens a 3.510 aumentos.

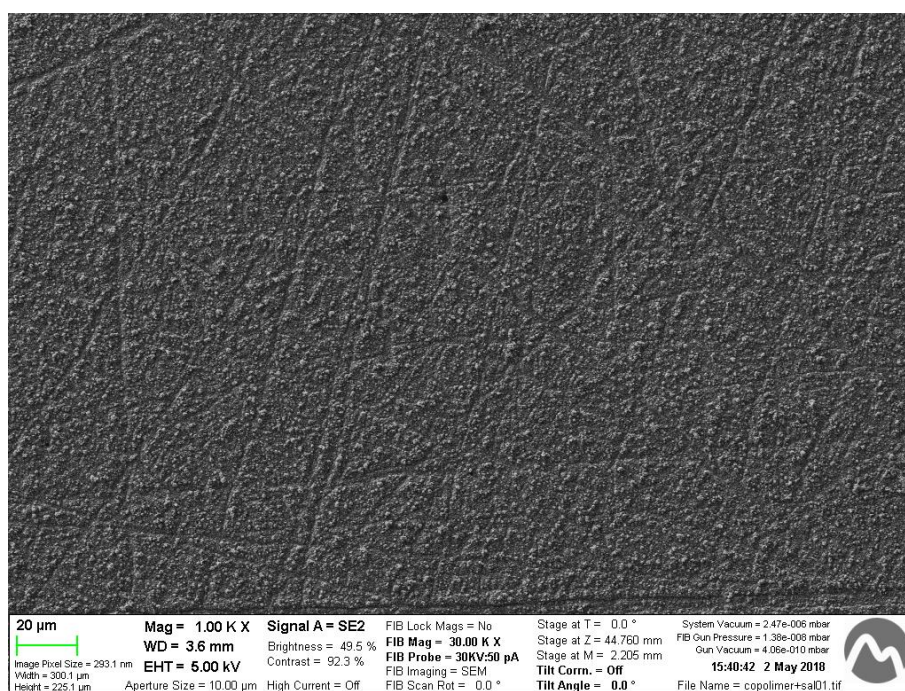


Figura 122. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal SE2 a 1.000 aumentos.

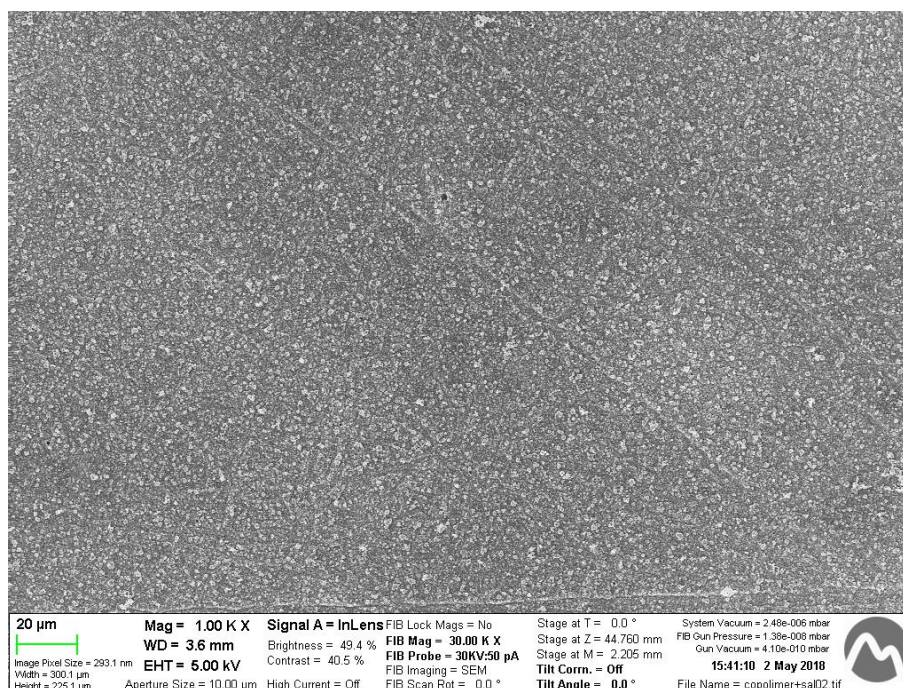


Figura 123. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal inLens a 1.000 aumentos.

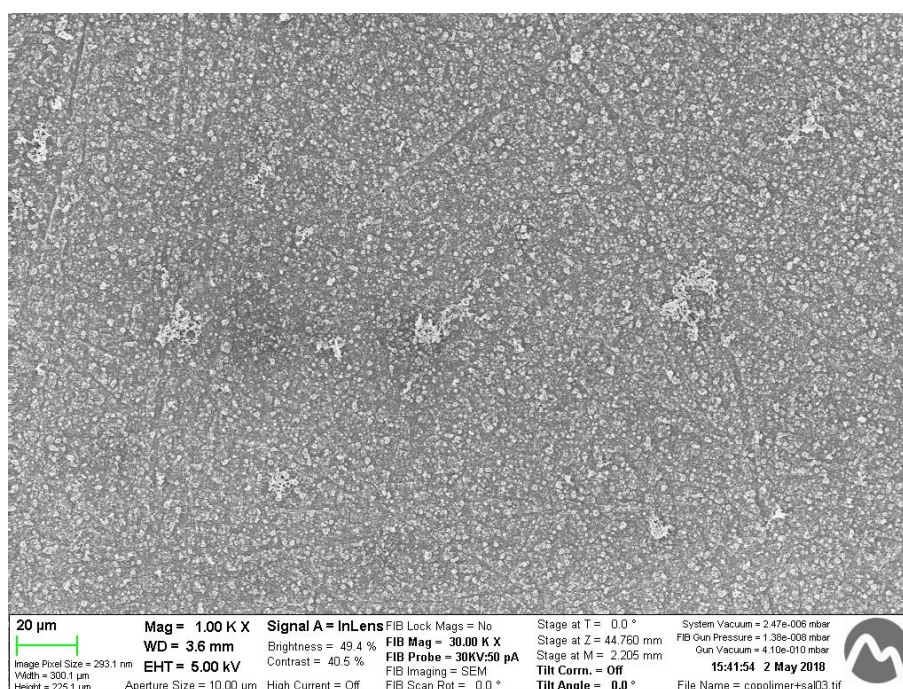


Figura 124. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal inLens a 1.000 aumentos.

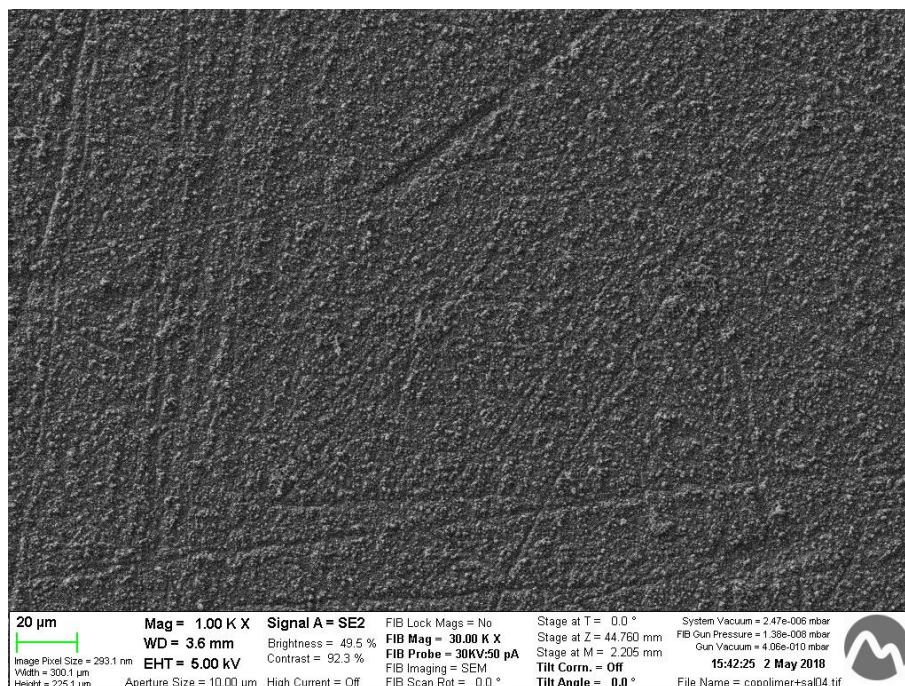


Figura 125. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal SE2 a 1.000 aumentos.

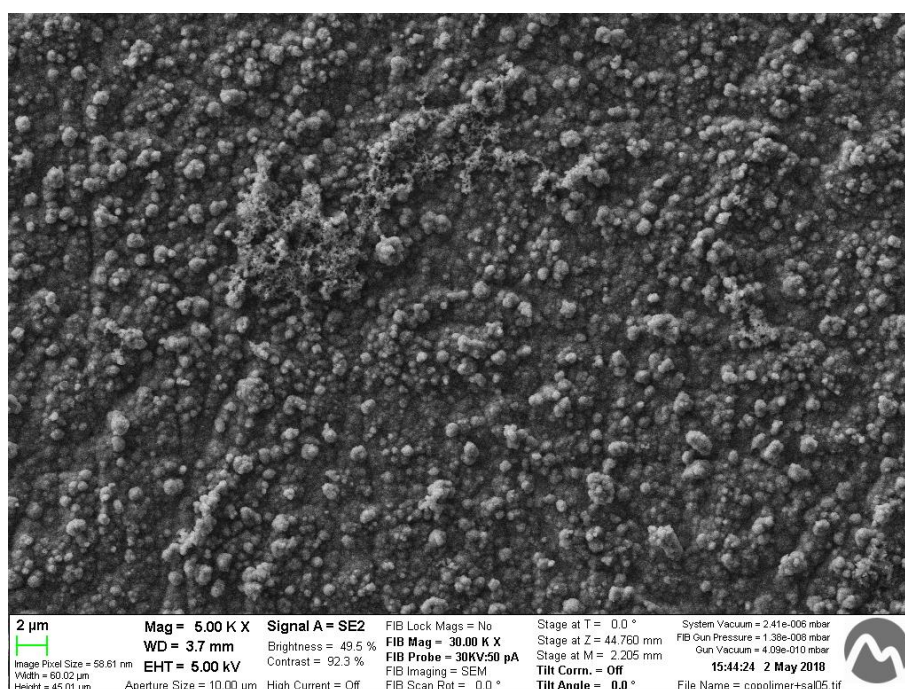


Figura 126. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal SE2 a 5.000 aumentos.

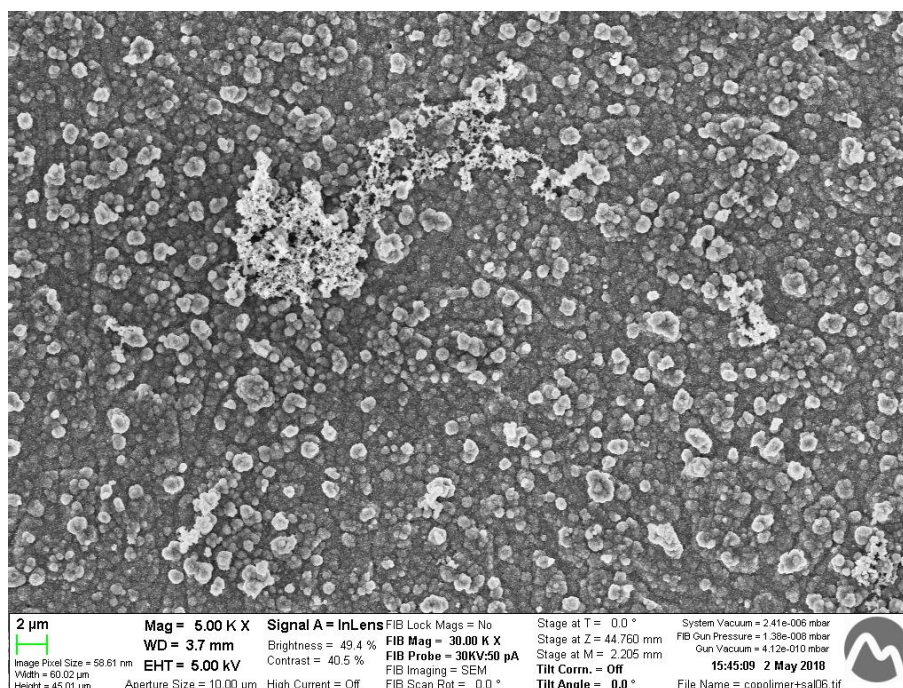


Figura 127. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal inLens a 5.000 aumentos.

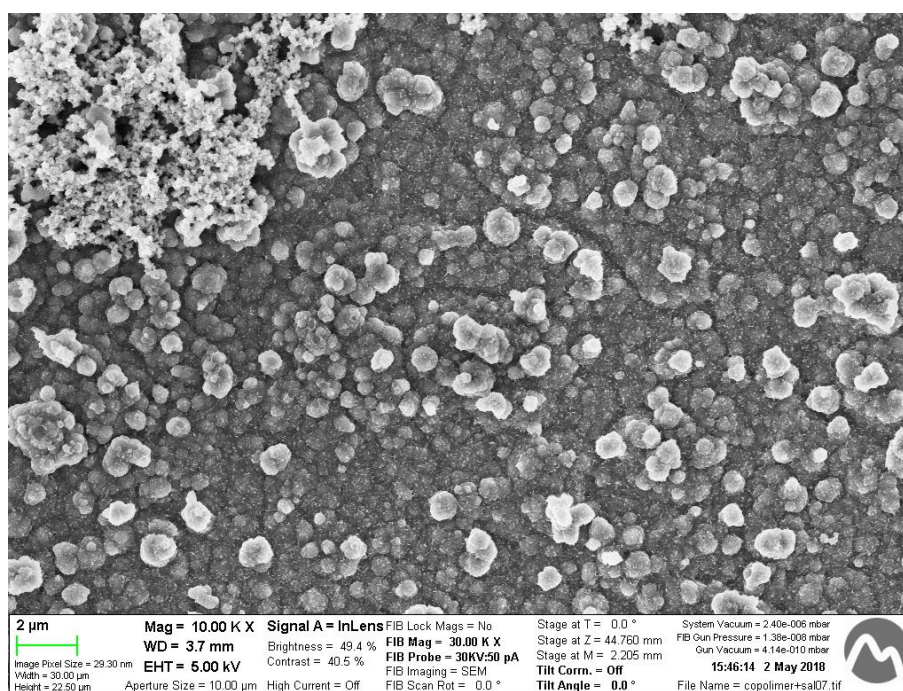


Figura 128. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal inLens a 10.000 aumentos.

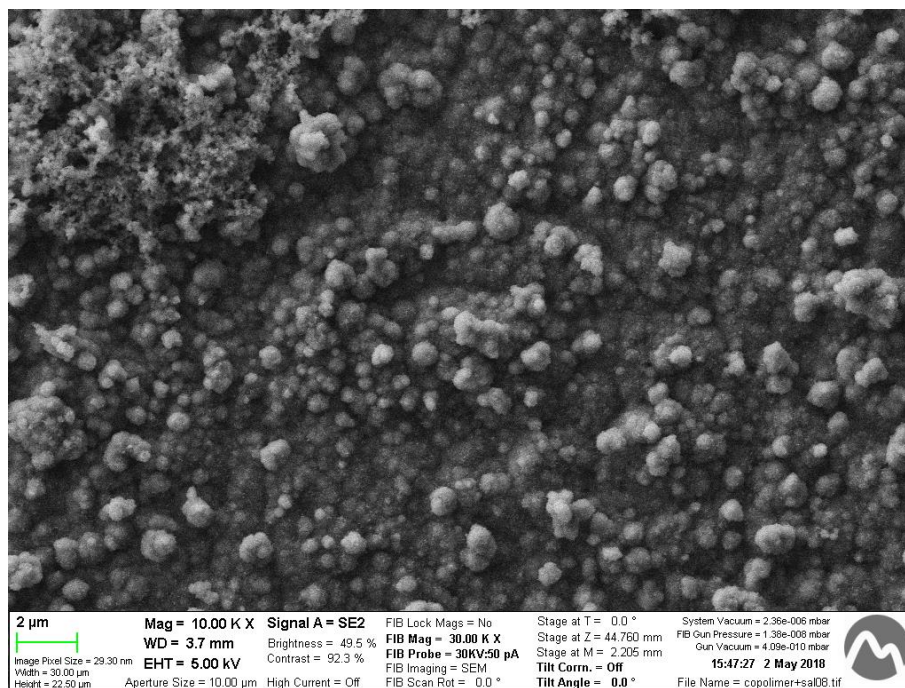


Figura 129. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal SE2 a 10.000 aumentos.

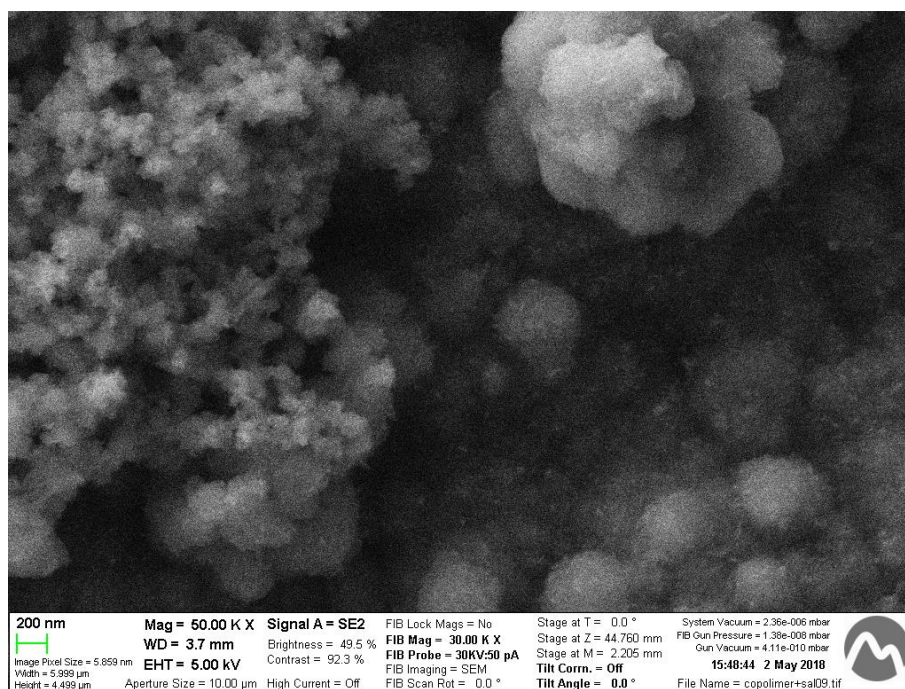


Figura 130. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal SE2 a 50.000 aumentos.

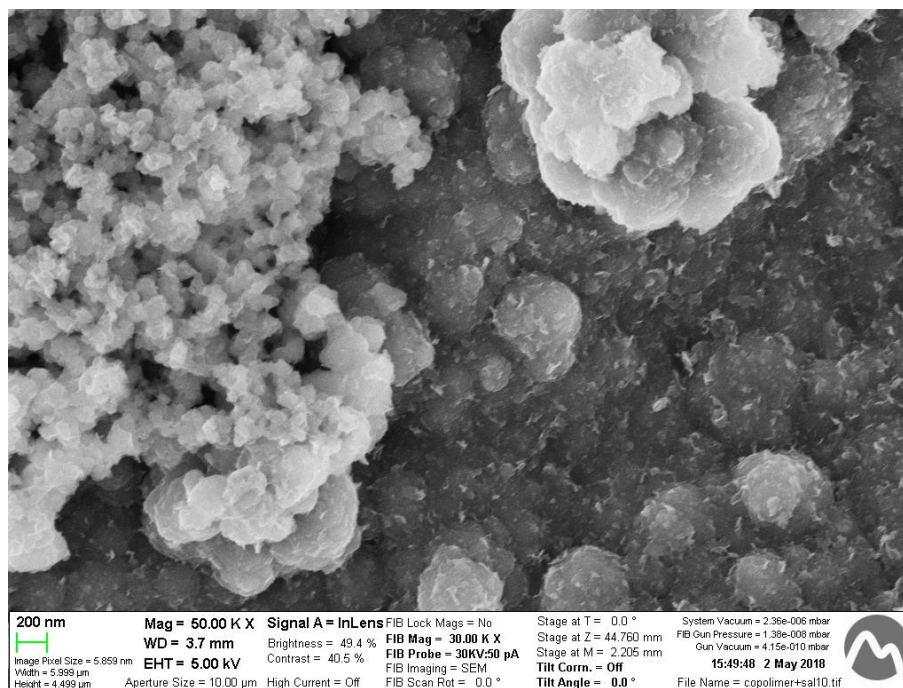


Figura 131. SEM del copolímero en la muestra de copolímero con deposición de sal inLens a 50.000 aumentos.